

31
24



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

OPTIMIZACION: ELEMENTOS DE TEORIA EN
SUPERFICIE DE RESPUESTA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
A C T U A R I O
P R E S E N T A N

LUIS MARIO HERNANDEZ ACEVEDO
JOSE GABRIEL HUERTA GOMEZ

CD. UNIVERSITARIA, D.F.

1991.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

INDICE

-Introducción	1
Bibliografía	5
-Capítulo I: Multiplicadores de Lagrange	
Introducción	6
I.1 Caso una Restricción en forma de Ecuación	7
I.2 Caso con M Restricciones Presentadas como Ecuaciones y k Variables Independientes ($M < k$)	16
I.3 Restricciones en Forma de Desigualdades	22
I.4 Condiciones Necesarias (Análisis de Puntos Críticos)	25
Bibliografía	29
-Capítulo II: Análisis Canónico	
Introducción	30
I.1 El Análisis Canónico	31
Bibliografía	49
-Capítulo III: Ascenso por Pendiente Máxima	
Introducción	50
III.1 El Ascenso por Pendiente Máxima	50
III.2 Ascenso por Pendiente Máxima Modificado	63
III.3 Estimación Óptima de la Dirección del Gradiente en el Método de Ascenso por Pendiente Máxima	69
III.3.1. Obtención de $E(\cos \theta)$	70
Bibliografía	74
-Capítulo IV: Análisis de Cordilleras	
Introducción	75
IV.1 El Análisis de Cordilleras	75
IV.2 Análisis de Cordilleras Modificado	96
Bibliografía	111

-Capítulo V: Tangentes Paralelas

Introducción	112
V.1 Descenso por Pendiente Máxima	113
V.2 Método de Descenso por Pendiente Máxima Iterado en Casos Ideales.	113
V.3 Descenso por Pendiente Máxima Iterado en dos dimensiones cuando las curvas de nivel son elípticas (η cuadrática)	114
V.4 Descenso por Pendiente Máxima Iterado en n dimensiones	116
V.5 Planteamiento de los Algoritmos de Tangentes Paralelas	118
V.6 Comentarios Respecto a la Dependencia de Escalas	122
V.7 Minimización en la Línea	124
V.8 Observaciones Finales a los Métodos Tanpar-	132
Bibliografía	135
- Conclusiones	136
Bibliografía	143

INTRODUCCION

La metodología de Superficie de Respuesta es un conjunto de técnicas estadísticas y matemáticas cuya finalidad es organizar la información experimental producida durante un proceso observado y optimizar el proceso. Principalmente se ha desarrollado en el área química y en aquellas áreas donde se permiten las repeticiones de experimentos. Una de las primeras referencias que se tienen sobre el tema la dieron Box y Wilson en 1951.

Por ejemplo, en química un problema de Superficie de Respuesta se presenta cuando interesa estudiar el máximo grado de pureza de una cierta sustancia que depende a su vez de algunos factores que pueden ser controlados (variables independientes).

En general, la metodología de Superficie de Respuesta se utiliza en situaciones en donde un gran número de variables independientes afectan una o más variables dependientes del proceso en estudio.

A esta variable de interés, se le denominará como la respuesta y se denotará por Y . Aquí la respuesta será medida en una escala continua. Las variables que la afectan denotadas por x_1, x_2, \dots, x_k , también son cuantitativas y sus niveles son determinados por el investigador.

Difícilmente se podrían determinar todos los factores que determinan a la respuesta Y y aunque estos se pudieran especificar, es común cometer errores en su medición.

Entonces, para poder formular matemáticamente el problema de Superficie de Respuesta es necesario pensar en que la relación funcional entre Y y x_1, x_2, \dots, x_k es

$$Y = \eta(x_1, x_2, \dots, x_k) + c,$$

donde c es un error aleatorio debido a las fallas en la medición y a la incapacidad para determinar todos los factores que afectan a Y . η especifica la forma en que

x_1, x_2, \dots, x_k afectan a la respuesta. η es conocida como respuesta promedio.

Adicionalmente se supondrá que η se puede aproximar mediante un polinomio de grado menor o igual que dos con parámetros desconocidos que se deben estimar.

A partir de aquí habrá que determinar x_1, x_2, \dots, x_k que proporcionen una respuesta óptima. Para lograr esto se necesita:

a) Determinar una zona (conocida como región experimental) donde se puedan dar diferentes combinaciones de niveles para x_1, x_2, \dots, x_k y tomar observaciones experimentales de Y en estas combinaciones. A esto se le conoce como construcción de el diseño experimental.

b) Apoyándose en la información de a), hacer un ajuste de η (denotado por $\hat{\eta}$) y verificar su calidad. $\hat{\eta}$ es una aproximación de η . A esta etapa de la metodología se le conoce como Análisis de Regresión.

c) $\hat{\eta}$ es utilizada para predecir x_1, x_2, \dots, x_k que den respuesta óptima y también para analizar el comportamiento de la superficie cerca de óptimos.

De aquí que el experimentador se enfrente a las siguientes dificultades:

i) ¿Qué diseño utilizar?

ii) ¿Qué modelo ajustar?

Myers (1971) y Khuri y Cornell (1987) dejan ver en sus textos la relación de las dos preguntas planteadas. De acuerdo al modelo se propone un diseño. Aunque el objetivo central del este trabajo no es responder i) y ii) se da información al respecto. Por el momento, sólo es importante destacar que las respuestas a estas preguntas dependen del grado de avance en la investigación y que algunos de los criterios de selección involucran la varianza de la respuesta pronosticada.

Otro de los objetivos de las técnicas que se

plantean en Superficie de Respuesta surge cuando las condiciones de optimalidad en c) son inadecuadas o no se pueden determinar. Aprovechar la información dada por el diseño y ajuste resulta un aspecto de interés.

El objetivo central de esta tesis es abordar la teoría necesaria para determinar condiciones de optimalidad y dar un diagnóstico en caso de no tener conclusiones satisfactorias.

En el capítulo I se estudian los Multiplicadores de Lagrange (que son indispensables en todo el resto del trabajo), comenzando con el caso que presenta una sola restricción y finalizando con el caso de varias restricciones.

En el capítulo II se presenta el Análisis Canónico, que describe el problema de optimizar un polinomio de segundo orden. Se verá que no presenta dificultades técnicas fuera de lo común. Se deja en claro la necesidad de desarrollar técnicas de aplicación previas y posteriores al Análisis Canónico como son el Método de Ascenso por Pendiente Máxima (Capítulo III) y Análisis de Cordilleras (Capítulo IV) respectivamente.

Es importante mencionar que el Método de Ascenso por Pendiente Máxima tiene como objetivo encontrar una mejor región experimental, mejor en el sentido de que en esta se encuentren las combinaciones de las variables independientes que maximizan la respuesta promedio estimada.

El Análisis de Cordilleras, cuyo desarrollo matemático es similar al del Método de Ascenso por Pendiente Máxima, también puede pensarse como un procedimiento para encontrar las condiciones operativas óptimas; el Análisis de Cordilleras muchas veces se emplea cuando con Análisis Canónico no se pudieran determinar dichas condiciones. El contenido de los capítulos II, III, IV en sus secciones principales, es lo que constituye la teoría elemental de Superficie de

Respuesta

Se finaliza el trabajo con el desarrollo de los Métodos de Tangentes Paralelas presentados en el Capítulo V. Estos métodos describen algoritmos para la búsqueda de óptimos con la posibilidad de ejecutarse empíricamente.

Es importante mencionar que este trabajo intenta desarrollar, mas que cinco diferentes procedimientos, una metodología completa la cual puede resultar provechosa si se aplica correctamente.

Sin embargo, también se elaboró cada capítulo de manera que pueda ser leído recurriendo lo menos posible a otros capítulos.

Se considera que los conocimientos previos para hacer accesible la lectura del trabajo son: Diseño de Experimentos, sobre todo los diseños 2^k y Análisis de Regresión Lineal Múltiple. Se recomienda para su estudio Hicks (1982), Cochran (1957) y Draper y Smith (1981) en aspectos de regresión. Una visión global sobre el tema de Superficie de Respuesta se puede ver en Cochran, Box, Campbell (1968).

BIBLIOGRAFIA

- Box, G.E.P. y K.B. Wilson (1951). *On the Experimental Attainment of Optimum Conditions*, *J. Roy. Statistic. Soc.*, B13, 1-45.
- Box, G.E.P., D.T. Campbell y W.G. Cochran (1968). *Experimental Design*, *International Encyclopedia of Statistics*, Vol. I, 285-305, London: Collier Macmillan Publishers.
- Cochran W.G. y G.M. Cox (1957). *Diseños Experimentales*, 2da. Ed., Trillas.
- Draper, N.R. y H. Smith (1981). *Applied Regression Analysis*, 2da ed., New York: John Wiley.
- Hicks, C.R. (1982). *Fundamental Concepts of Design of Experiments*, 3era ed., New York: Holt Rinehart and Winston.
- Khuri, A.I. y J.A. Cornell (1987). *Response Surfaces*, New York: Marcel Dekker Inc.
- Myers, R.H. (1971). *Response Surface Methodology*, Boston: Allyn and Bacon Inc.

CAPITULO I MULTIPLICADORES DE LAGRANGE

INTRODUCCION

Uno de los problemas que se presenta en matemáticas es el de optimización.

Existen numerosas clases de funciones que deben ser optimizadas, hay varios métodos para obtener los puntos de respuesta óptima y la decisión de utilizar alguno específico depende de la naturaleza del problema que se esté tratando.

En muchas situaciones se presenta la necesidad de optimizar dos o mas funciones simultáneamente y es común que este problema no se pueda resolver optimizando por separado, pues el óptimo en una función no necesariamente es el óptimo en las otras.

Supóngase por ejemplo, que se tienen funciones que describen ganancia, sueldo y gastos generales. Desde el punto de vista de un empresario lo que se buscaría es maximizar la ganancia y minimizar los sueldos y gastos generales. Para resolver el problema y hacer de lado las dificultades de optimizar las funciones una por una, se puede intentar maximizar las ganancias fijando niveles adecuados para los sueldos y los gastos. Esto se sintetiza diciendo que se busca optimizar una función objetivo sujeta a varias restricciones.

Si existen funciones k -dimensionales f y g_1, \dots, g_m que modelen una situación como la del empresario que quiere maximizar sus ganancias, el problema tiene posibilidad de resolverse utilizando algunas técnicas del cálculo diferencial. Como se verá posteriormente estas técnicas de optimización restringida son utilizadas en el desarrollo de los demás métodos de superficie de respuesta. Nóte que se parte del supuesto de que las funciones ya existen, el como construirlas no se discute en este capítulo.

I.1.- CASO UNA RESTRICCIÓN EN FORMA DE ECUACION

Cuando se presenta el problema de optimizar alguna función con restricciones lo más simple que puede ocurrir es que la restricción tenga forma de ecuación. Se desarrolla mediante un ejemplo como proceder en estos casos.

Ejemplo I.1.1.- (Marsden y Tromba (1981))

Supóngase que se quiere minimizar la función $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, definida por

$$f(x, y) = x^2 + y^2$$

sujeta a la restricción

$$y = x + 1.$$

Las curvas de nivel (C.N.) de f son círculos concéntricos, cuyo centro es el origen. Mientras los radios de los círculos sean menores, la función tomará valores más pequeños.

Para encontrar el punto que satisfaga a la restricción y además que corresponda al mínimo, debe hallarse aquella C.N. cuya tangente sea la restricción y el punto que corresponde al mínimo, será el punto de tangencia.

Para justificar esta afirmación, supóngase que el mínimo no es el punto de tangencia. Entonces, podrían pasar una de dos cosas:

1) Que la C.N. que pasa por el mínimo y la restricción no se intersecten (ya que por cualquier punto del plano pasa un círculo con centro en el origen, en particular existe una C.N. en el mínimo), o bien

2) Que la restricción sea secante a la C.N. del mínimo.

Como el óptimo debe estar sobre la restricción, el primer caso queda automáticamente excluido.

Para el segundo caso, por ser la restricción secante, hay dos puntos donde se intersecta ésta y la C.N. del mínimo. Uno de ellos debe ser el óptimo considerado, ya que este se encuentra sobre la restricción y su curva de nivel.

Sean P_1 y P_2 los puntos de intersección y considérese el punto medio P^* del segmento $\overline{P_1P_2}$, que también se encuentra sobre la restricción por ser esta una recta.

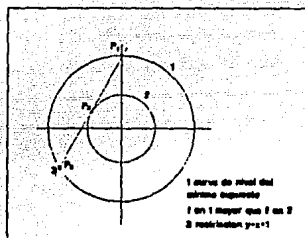
El círculo de radio $\|P^*\|$ y centro en $(0,0)$, está dentro de la región acotada por la curva de nivel en la cuál se encuentra el mínimo. Como la función vale menos en círculos de radio mas pequeño

$$f(P^*) < f(P_1) = f(P_2).$$

Puesto que P_1 o P_2 es el mínimo se llega a una contradicción, ya que P^* tiene una respuesta estrictamente menor a la del mínimo.

En conclusión, el punto que corresponde al mínimo es un punto donde alguna C.N. y la restricción son tangentes. Ver figura I.1.1.

FIGURA I.1.1



Una forma para encontrar las coordenadas del óptimo, es resolver simultáneamente el sistema

$$x^2 + y^2 = c \text{ con } c > 0 \quad (1)$$

$$y - x - 1 = 0 \quad (2)$$

Se debe buscar el valor de c para que exista solución única ya que así se garantizará la tangencia entre la restricción y la curva de nivel y por tanto la obtención del mínimo.

De (2) se tiene que

$$y = x + 1$$

sustituyendo lo anterior en (1) se llega a

$$x^2 + (x+1)^2 = c \Rightarrow 2x^2 + 2x + (1-c) = 0$$

Las soluciones de esta ecuación están dadas por

$$x_{1,2} = \frac{-2 \pm \sqrt{4 - 4(2)(1-c)}}{4} \quad (3)$$

Para que exista solución única se necesita que

$$\begin{aligned} x_1 &= x_2 = \sqrt{4 - 4(2)(1-c)} = 0 \\ &= 4 - 4(2)(1-c) = 0 \\ &= c = 1/2. \end{aligned}$$

Sustituyendo $c = 1/2$ en (3)

$$x_1 = x_2 = -1/2$$

y evaluando en (2)

$$y = 1/2.$$

Entonces, el punto que corresponde al mínimo es $(-1/2, 1/2)$.

Este método no es fácilmente generalizable. Cuando el número de variables independientes es mayor que tres resulta difícil visualizar geoméricamente el problema y sin importar el número de variables, no se sabe que tan complicadas sean las ecuaciones que definen a la restricción y a la función objetivo en vías de resolver el sistema correspondiente.

Para

$$f(x,y) = x^2 + y^2$$

se denotará con P_0 al punto óptimo.

La restricción $y-x-1=0$ se puede ver como la C.N. de valor cero de la función $g(x,y) = y-x-1$.

El gradiente de una función diferenciable, definido como el vector formado por las derivadas parciales de la función respecto a cada una de las variables y evaluadas en x , siempre es perpendicular a la curva de nivel que pasa por x . (Siempre que dicho gradiente sea diferente del vector cero.)

En $P_0 = (-1/2, 1/2)$ resulta que, $\nabla f(P_0) = (-1, 1) \neq 0$ y por tanto $\nabla f(P_0)$ es perpendicular a la C.N. de f a la que pertenece P_0 . $\nabla g(P_0)$ también es perpendicular a la restricción en el punto óptimo, ya que $\nabla g(P_0) = (-1, 1) \neq 0$.

Como las curvas $f(x,y) = 1/2$ y $g(x,y) = 0$ son

tangentes en P_0 , resulta que $\nabla f(P_0)$ y $\nabla g(P_0)$ son ortogonales a la tangente común que pasa por P_0 , por lo que $\nabla f(P_0) = \lambda \nabla g(P_0)$ (Es decir, los gradientes son paralelos).

Este paralelismo se puede verificar con facilidad en el ejemplo ya que

$$\nabla f(P_0) = (-1, 1) \text{ y } \nabla g(P_0) = (-1, 1),$$

entonces

$$\nabla f(P_0) = 1 \nabla g(P_0).$$

En general, esta propiedad de los gradientes en puntos correspondientes a óptimos, se cumple bajo ciertas hipótesis, como lo establece el siguiente teorema.

Teorema I.1.1 (Marsden (1981))

TEOREMA DE LAGRANGE

Sean $f: U \subseteq \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ y $g: U \subseteq \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciables. U abierto. Sea $x_0 \in U$ y $g(x_0) = 0$ y sea S el conjunto de nivel de valor cero de g . Supóngase que $\nabla g(x_0) \neq 0$. Si f está restringida a S y tiene un máximo o un mínimo en x_0 , entonces existe un número real λ tal que

$$\nabla f(x_0) = \lambda \nabla g(x_0).$$

Este teorema da la pauta para resolver problemas con una sola restricción, para los cuales se puede plantear el siguiente algoritmo.

Primero se debe garantizar la existencia del óptimo, posteriormente verificar que las funciones que definen el problema sean diferenciables y que el gradiente de g sea diferente de cero en todos los puntos sobre la restricción. Lo anterior es con la finalidad de que el óptimo satisfaga

$$\begin{aligned} \nabla f &= \lambda \nabla g \\ g(x) &= 0. \end{aligned}$$

Así se determinará un sistema con $k+1$ ecuaciones y $k+1$ incógnitas (la $k+1$ -ésima incógnita es λ , que comúnmente se le denomina multiplicador de Lagrange). A las soluciones de este sistema, se les llaman puntos críticos.

No todo punto crítico será óptimo. Los puntos críticos pueden ser máximos, mínimos o puntos sillas.

Es importante hacer énfasis en que cada una de las condiciones establecidas, son necesarias para hallar los óptimos dentro de los puntos críticos.

Muchas veces la condición $\nabla g=0$ es ignorada. Las consecuencias de esta actitud se pueden ilustrar mediante un ejemplo.

Ejemplo I.1.2 (Courant (1984))

Supóngase que se desea minimizar

$$f(x,y)=x^2+y^2$$

sujeito a

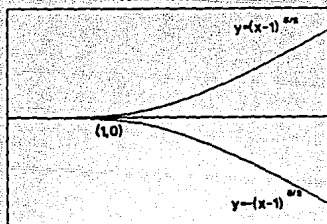
$$g(x,y)=(x-1)^3-y^2=0.$$

De la restricción se obtienen las ecuaciones

$$y=(x-1)^{3/2}, y=-(x-1)^{3/2}.$$

Gráficamente, la restricción está dada por la figura I.1.2.

FIGURA I.1.2



x^2+y^2 representa la distancia del punto (x,y) al origen.

En este caso, el punto más cercano al origen sobre $g(x,y)=0$, es el $(1,0)$. Es decir, $f(x,y)$ alcanza un mínimo en $(1,0)$ sujeto a que $g(x,y)=0$.

Ahora

$$\frac{\partial g}{\partial x} = 3(x-1)^2$$

$$\frac{\partial g}{\partial y} = -2y$$

de aquí que

$$\nabla g(1,0) = (0,0)$$

y además es fácil ver que

$$\nabla f(1,0) = (2,0).$$

Es claro que $(1,0)$ no es un punto crítico ya que no existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que $\nabla f = \lambda \nabla g$.

En conclusión, si el gradiente no es distinto de cero en toda la restricción, puede suceder que el óptimo no sea un punto crítico, aun cuando la función objetivo f y la restricción cumplan con las condiciones restantes establecidas en el teorema I.1.1.

Otra forma equivalente de determinar los puntos críticos para el problema con una restricción es la siguiente.

Se define la conocida función de Lagrange como

$$F = f + \lambda g.$$

Posteriormente se plantean las ecuaciones

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0 \quad \forall i = 1, \dots, k$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0$$

y finalmente se resuelve el sistema dado por estas derivadas parciales.

Los puntos críticos obtenidos al resolver este sistema o el sistema $\nabla f = \lambda \nabla g$ coinciden puesto que:

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = \frac{\partial f}{\partial x_i} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x_i} = 0 \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial x_i} = -\lambda \frac{\partial g}{\partial x_i}.$$

Haciendo $-\lambda = \lambda$, para toda $i = 1, \dots, k$ se obtiene

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = -\lambda \frac{\partial g}{\partial x_i} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial x_i} = \lambda \frac{\partial g}{\partial x_i},$$

con lo que se cumple que $\nabla f = \lambda \nabla g$. La restricción es recuperada al hacer

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0$$

ya que

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = 0 \Rightarrow g = 0.$$

A continuación se verán algunos que ilustran la técnica hasta ahora discutida.

Ejemplo I.1.3.- (Marsden y Tromba (1981))

Sea

$$f(x, y, z) = x + z$$

sujeta a

$$g(x, y, z) = 0$$

donde

$$g(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 1.$$

i) La función objetivo f , alcanza el máximo y el mínimo porque es continua y la restricción define un conjunto cerrado y acotado.

ii) f y g son diferenciables en todo \mathbb{R}^3 .

iii) Se tiene que $\nabla g = (2x, 2y, 2z)$. El único punto que satisface $\nabla g = 0$ es el $(0, 0, 0)$, pero éste no está sobre la restricción, ya que

$$g(0, 0, 0) = x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0^2 + 0^2 + 0^2 - 1 = -1 \neq 0.$$

iv) Los puntos críticos son aquellos $\underline{v} \in \mathbb{R}^3$ que cumplen

$$\nabla f(\underline{v}) = \lambda \nabla g(\underline{v})$$

igualdad que determina las siguientes ecuaciones

$$1 = 2\lambda x \quad (1)$$

$$0 = 2\lambda y \quad (2)$$

$$1 = 2\lambda z \quad (3)$$

$$x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0 \quad (4)$$

De (1)

$$\lambda \neq 0$$

por lo tanto de (2)

$$y = 0.$$

De (1) y (3)

$$x = z = 1/2\lambda$$

sustituyendo en (4)

$$2x^2 = 1 \Leftrightarrow x = \pm 1/\sqrt{2} = z.$$

Los únicos puntos críticos son $(1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$ y $(-1/\sqrt{2}, 0, -1/\sqrt{2})$. Como se satisfacen las condiciones para que los óptimos se encuentren entre los puntos críticos, uno de estos corresponde al máximo y el otro al mínimo. Para definir cuál es cuál, sólo hay que evaluar los puntos en f y determinar en donde la función es mayor, con lo que, $(1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$

corresponde al valor máximo y $(-1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$ corresponde al mínimo.

Ejemplo 1.1.4 (Umland y Smith (1959))

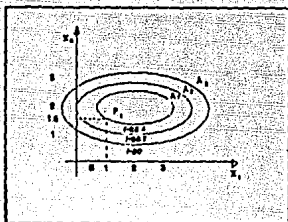
Sea:

$f(x_1, x_2) = 55.24 - 7.31x_1 + 26.65x_2 - 3.03(x_1)^2 - 6.96(x_2)^2 + 2.69x_1x_2$
 sujeta a:

$g(x_1, x_2) = 55.71 - 21.85x_1 + 8.59x_2 - 5.2(x_1)^2 - 5.18(x_2)^2 - 6.26x_1x_2 - 90 = 0$

En la figura 1.1.3 las curvas de nivel de $f(x_1, x_2)$ están representadas por las letras (A) y la restricción por la (B). En la misma figura es fácil ver que existe un punto máximo, este se ubica cercano a los valores $x_1=1$ y $x_2=1.5$. Si se sustituyen estos valores de x_1 y x_2 en f se obtiene una respuesta de 88.45 y en g un valor de 90.21.

FIGURA 1.1.3



Se resolverá este problema aplicando la técnica de Multiplicadores de Lagrange.

Primero se obtienen las derivadas parciales

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = 7.31 - 6.06x_1 + 2.69x_2$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = 26.65 - 2.69x_1 - 13.92x_2$$

$$\frac{\partial g}{\partial x_1} = 21.85 - 18.40x_1 - 6.26x_2$$

$$\frac{\partial g}{\partial x_2} = 8.59 - 6.26x_1 - 10.36x_2$$

Geoméricamente, se ha garantizado la existencia del óptimo. Además, f es continua y $g=0$ es un compacto.

La condición $\nabla g=0$, sobre los puntos que están en la restricción (para garantizar que el óptimo está entre los puntos críticos) se puede verificar encontrando x_1, x_2 tales que $\frac{\partial g}{\partial x_1} = \frac{\partial g}{\partial x_2} = 0$ y viendo

que estos valores x_1 , x_2 no satisfacen la restricción. Es fácil encontrar que valores de x_1 y x_2 hacen las parciales de g cero, ya que las ecuaciones por resolver son lineales y además su determinante es -10.43.

Las funciones f y g son claramente diferenciables de esta manera, el óptimo se encuentra dentro de los puntos críticos.

El sistema que determina los puntos críticos es

$$7.31 - 6.06x_1 + 2.69x_2 + \lambda(21.85 - 18.4x_1 - 6.26x_2) = 0 \quad (1)$$

$$26.65 + 2.69x_1 - 13.92x_2 + \lambda(8.59 - 6.26x_1 - 10.36x_2) = 0 \quad (2)$$

$$85.72 + 21.85x_1 + 8.59x_2 - 9.20(x_1)^2 - 5.18(x_2)^2 - 6.26x_1x_2 = 0 \quad (3)$$

El manejo de alguna técnica de Análisis Numérico para resolver sistemas de ecuaciones no lineales en forma simultánea, es muy útil en este caso.

Una forma de solucionar el sistema es la siguiente:

Utilizando (1) y (2) se puede expresar a x_1 y x_2 en términos de λ como

$$x_1 = (173.44 + 236.16\lambda + 172.99\lambda^2) / (77.12 - 159.67\lambda - 229.81\lambda^2)$$

$$x_2 = (181.16 + 451.32\lambda + 21.28\lambda^2) / (77.12 - 159.67\lambda - 229.81\lambda^2)$$

Si se dan valores a λ y se sustituyen en estas dos expresiones se obtienen x_1 y x_2 . Después, se debe ir evaluando en g hasta que se encuentre una pareja (x_1, x_2) que satisfaga la restricción aproximadamente.

Los ensayos que aparecen en la tabla I.1.1 se hicieron usando una calculadora de escritorio, lo cuál muestra la simplicidad del método.

TABLA I.1.1

λ	x_1	x_2	$f(x_1, x_2)$	$g(x_1, x_2)$
0	2.25	2.35	46.85	5.36
-0.1	1.67	1.58	80.68	1.43
-0.2	1.17	0.92	95.46	-8.23
-0.15	1.48	1.19	89.8	-3.38

Aquí la idea geométrica inicial fué muy importante, ya que conjuntamente con los cálculos permite asegurar que las condiciones óptimas son aproximadamente (1.67,

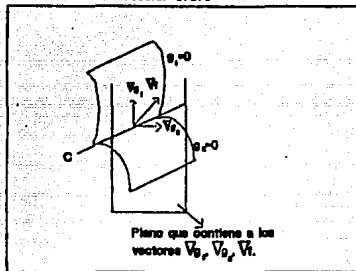
1.58).

I.2 CASO CON M RESTRICCIONES PRESENTADAS COMO ECUACIONES Y K VARIABLES INDEPENDIENTES ($M < K$)

Suponga que $f(x,y,z)$ representa la temperatura en un punto del espacio. Considere el problema de obtener el óptimo restringido a una curva C dada por las superficies de nivel $g_1(x,y,z)=0$ y $g_2(x,y,z)=0$. Se dará por hecho que f , g_1 y g_2 son diferenciables.

$\nabla g_1(x,y,z)$ y $\nabla g_2(x,y,z)$ son normales a las superficies $g_1(x,y,z)=0$ y $g_2(x,y,z)=0$, respectivamente, luego también lo son a la curva de intersección C (figura I.2.1).

FIGURA I.2.1



Suponga que C está dada por $\alpha(t)$ derivable con $t \in [a,b]$. Sobre la curva C , la función temperatura depende sólo de t , es decir, $g(t)=f(\alpha(t))$ denota la temperatura sobre C . Si g tiene un óptimo relativo en algún $t_1 \in [a,b]$, se verifica entonces que $g'(t_1)=0$.

Si se utilizan las hipótesis hechas sobre α y f , se puede aplicar la regla de la cadena, así se obtiene que

$$g'(t) = \nabla f(\alpha(t)) \cdot \alpha'(t),$$

pero

$$\nabla f(\alpha(t_1)) \cdot \alpha'(t_1) = 0,$$

puesto que $g'(t_1)=0$.

Ya que $\alpha'(t_1)$ es tangente a C en $\alpha(t_1)$ y el producto escalar entre $\nabla f(\alpha(t_1))$ y $\alpha'(t_1)$ es cero entonces $\nabla f(\alpha(t_1))$ es ortogonal a C en $\alpha(t_1)$.

En conclusión $\nabla g_1(\alpha(t_1))$, $\nabla g_2(\alpha(t_1))$ y $\nabla f(\alpha(t_1))$ son ortogonales a C en $\alpha(t_1)$.

Geoméricamente es claro que tres o mas vectores ortogonales a una curva en \mathbb{R}^3 se encuentran en un plano (sólo se puede ser ortogonal a una curva en \mathbb{R}^3 en dos direcciones, figura I.2.1).

Finalmente, si los vectores ∇g_1 y ∇g_2 en $\alpha(t_1)$ fuesen linealmente independientes

$$\nabla f(\alpha(t_1)) = \lambda_1 \nabla g_1(\alpha(t_1)) + \lambda_2 \nabla g_2(\alpha(t_1)).$$

Todos los vectores está en un plano y ∇g_1 , ∇g_2 generan dicho plano.

El siguiente teorema formaliza las ideas anteriores.

Teorema I.2.1 (Apostol 1980)

Sean f , g_1 , g_2, \dots, g_m funciones definidas en $U \subseteq \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ ($m < k$), todas ellas diferenciables en U con U abierto. Sea $x_0 \in \mathbb{R}^k$ un punto óptimo de f restringida a $g_1=0$, $g_2=0, \dots, g_m=0$. Si además los vectores $\nabla g_1(x_0)$, $\nabla g_2(x_0), \dots, \nabla g_m(x_0)$ son linealmente independientes, entonces

$$\nabla f(x_0) = \lambda_1 \nabla g_1(x_0) + \lambda_2 \nabla g_2(x_0) + \dots + \lambda_m \nabla g_m(x_0).$$

Se acostumbra olvidar la verificación de que $\nabla g_1(x_0), \dots, \nabla g_m(x_0)$ sean linealmente independientes. El siguiente ejemplo ilustra los problemas que esto origina.

Ejemplo I.2.1 (Apostol (1980))

Se desea minimizar

$$f(x, y, z) = x^2 + y^2$$

sujeta a

$$g_1(x, y, z) = 0 \text{ y } g_2(x, y, z) = 0$$

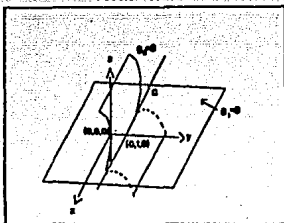
donde

$$g_1(x, y, z) = z \text{ y } g_2(x, y, z) = z^2 - (y-1)^3.$$

g_1 y g_2 se cortan en una recta a la que se

denotara por C . (ver figura 1.2.2).

FIGURA 1.2.2



$f(x,y,z)$ es la distancia de un punto (x,y,z) al eje Z . Sujeto a la curva C , se obtiene que la distancia f se minimizará donde C cruce al eje Y . C y el eje Y se intersectan en el punto $(0,1,0)$. Por tanto f sujeta a C tiene mínimo en $(0,1,0)$.

Ahora $\nabla g_1(0,1,0)=(0,0,1)$, $\nabla g_2(0,1,0)=(0,0,0)$ y $\nabla f(0,1,0)=(0,2,0)$ es imposible que

$$\nabla f(0,1,0)=\lambda_1\nabla g_1(0,1,0)+\lambda_2\nabla g_2(0,1,0).$$

De esta manera se obtiene un óptimo en $(0,1,0)$ sin que ocurra que ∇f , $\nabla g_1(x_0)$, ..., $\nabla g_m(x_0)$ sean vectores linealmente independientes.

El Método de los Multiplicadores de Lagrange para una función f sujeta a m restricciones $g_1=0, \dots, g_m=0$ es el siguiente:

Se debe garantizar

- que el problema tenga un óptimo
- que las funciones sean diferenciables, y
- que los gradientes de las funciones que determinan las restricciones sean linealmente independientes sobre la intersección de todas estas.

De ocurrir a), b) y c), el o los óptimos se encontrarán entre alguno de los llamados puntos críticos.

En este caso, un punto crítico será aquel que satisfaga el sistema, (de $k+m$ ecuaciones con $k+m$ incógnitas), formado por:

i) Las ecuaciones determinadas por la igualdad

$$\nabla f = \lambda_1 \nabla g_1 + \dots + \lambda_m \nabla g_m$$

donde las incógnitas son $x_1, x_2, \dots, x_n, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, y

ii) las m restricciones.

Un procedimiento alternativo para obtener los puntos críticos, similar al presentado en la sección I.1. se presenta a continuación.

En primer lugar se define la Función de Lagrange como

$$F = f + \lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2 + \dots + \lambda_m g_m.$$

Posteriormente se deben encontrar, los valores no necesariamente únicos, x_1, x_2, \dots, x_n y $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ tales que satisfagan las ecuaciones dadas por

$$\frac{\partial F}{\partial x_i} = 0 \quad \forall i=1, \dots, n$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda_i} = 0 \quad \forall i=1, \dots, m.$$

Los puntos críticos quedan determinados por los correspondientes vectores (x_1, x_2, \dots, x_n) .

La manera de demostrar que ambos sistemas producen las mismas soluciones es análoga a la del caso con una sola restricción.

Ahora se muestran ejemplos que ilustran la técnica discutida.

Ejemplo I.2.1 (Marsden y Tromba (1981))

Encontrar los puntos máximo y mínimo para

$$f(x, y, z) = x + y + z$$

sujeta a las condiciones

$$x^2 + y^2 = 2$$

$$x + z = 1.$$

En este caso las restricciones están dadas por

$$g_1(x, y, z) = x^2 + y^2 - 2 = 0, \quad g_2(x, y, z) = x + z - 1 = 0.$$

i) Existencia del máximo y el mínimo.

Obsérvese que las restricciones determinan un cilindro, la primera, y un plano, la segunda. Su intersección es un conjunto compacto (cerrado y acotado) en \mathbb{R}^3 . Como la función $f(x, y, z)$ es continua, entonces alcanza su máximo y su mínimo sobre el dominio

considerado.

ii) La diferenciabilidad se ve claramente de las funciones mismas.

ii) Se verá bajo que condiciones $\nabla g_1(x, y, z) = (2x, 2y, 0)$, $\nabla g_2(x, y, z) = (1, 0, 1)$ son linealmente dependientes.

Considérese

$$\alpha \nabla g_1 + \beta \nabla g_2 = 0,$$

esto es

$$\alpha(2x, 2y, 0) + \beta(1, 0, 1) = (0, 0, 0)$$

que da lugar a las ecuaciones

$$2x\alpha + \beta = 0, \quad 2y\alpha = 0, \quad \beta = 0$$

equivalentes a

$$2x\alpha = 0, \quad 2y\alpha = 0.$$

La dependencia lineal de los gradientes sólo va a ocurrir en el caso $\alpha \neq 0$, con lo que automáticamente resulta $x=0$, $y=0$, pero debe notarse que cualquier punto de la forma $(0, 0, z)$ no satisface $g_1=0$.

Por lo tanto, $\nabla g_1(x)$ y $\nabla g_2(x)$ son linealmente independientes para todo x que satisface $g_1(x)=0$, $g_2(x)=0$

iv) Determinación de los puntos críticos.

Se debe localizar x, y, z tales que

$$\nabla f(x, y, z) = \lambda_1 \nabla g_1(x, y, z) + \lambda_2 \nabla g_2(x, y, z)$$

$$g_1(x, y, z) = 0$$

$$g_2(x, y, z) = 0.$$

Ecuaciones que dan lugar a

$$2\lambda_1 x + \lambda_2 = 1 \quad (1)$$

$$2\lambda_1 y = 1 \quad (2)$$

$$\lambda_2 = 1 \quad (3)$$

$$x^2 + y^2 = 2 \quad (4)$$

$$x + z = 1 \quad (5)$$

Sustituyendo (3) en (1)

$$2\lambda_1 x = 0 \quad (6)$$

La ecuación (2) implica que $\lambda_1 \neq 0$, entonces de (6) se obtiene que $x=0$. Sustituyendo en (4) y (5) resulta que $y = \pm\sqrt{2}$, $z=1$.

Los puntos críticos son $(0, \sqrt{2}, 1)$ y $(0, -\sqrt{2}, 1)$. Uno de ellos corresponde al máximo y el otro al mínimo. Evaluando los puntos en la función objetivo f se encuentra que en $(0, \sqrt{2}, 1)$ se alcanza un máximo y en $(0, -\sqrt{2}, 1)$ un mínimo.

Para finalizar esta sección, se presentan condiciones suficientes para que un punto crítico sea máximo o mínimo. Estas condiciones serán utilizadas en el capítulo IV.

Teorema I.2.2.- (Draper (1963))

Sea $M(\underline{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_1 \partial x_k} \\ \frac{\partial^2 F}{\partial x_k \partial x_1} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_k \partial x_2} & \frac{\partial^2 F}{\partial x_k^2} \end{bmatrix}$ la matriz

hessiana de F , donde F es la función lagrangiana del problema de optimizar $f(\underline{x})$ sujeta a $g_i = 0, \forall i=1, \dots, k$.

Sea $\underline{a} \in \mathbb{R}^k$ un punto crítico, entonces si $M(\underline{a})$:

i) Es definida positiva (es decir $\underline{y}^T M \underline{y} > 0, \forall \underline{y} \neq 0$) hay un mínimo restringido en \underline{a} .

ii) Es definida negativa (es decir $\underline{y}^T M \underline{y} < 0, \forall \underline{y} \neq 0$) hay un máximo restringido en \underline{a} .

Se incluye aquí una idea intuitiva de la prueba, ya que este resultado no se encuentra con facilidad en los textos clásicos de Cálculo Diferencial.

Desarrollando F en series de Taylor se tiene que

$$F(\underline{a} + \underline{h}) - F(\underline{a}) = \frac{1}{2} \underline{h}^T M(\underline{a}) \underline{h} + O(\underline{h}^3).$$

Recuerdese que todas las primeras derivadas parciales de F son cero en $\underline{x} = \underline{a}$.

\underline{h} es un vector de incrementos pequeños con entradas h_i . $O(\underline{h}^3)$ es el residuo de tercer orden para tales incrementos.

Si $M(\underline{a})$ es definida positiva ocurre que $F(\underline{a} + \underline{h}) > F(\underline{a})$ para \underline{h} suficientemente pequeña.

Si se varía \underline{h} de tal manera que sólo las restricciones se satisfagan entonces

$$f(\underline{a} + \underline{h}) > f(\underline{a}).$$

En conclusión, se obtiene un punto mínimo local en \underline{a} , sujeto a las restricciones establecidas.

Observación:

Si \underline{a} es un punto silla de F , bien puede suceder que $F(\underline{a} + \underline{h})$ no sea mayor que $F(\underline{a})$ para algunos \underline{h} pequeños, pero $F(\underline{a} + \underline{h}) > F(\underline{a})$ para todo \underline{h} que haga que $\underline{a} + \underline{h}$ esté en la restricción. Por esto, la condición que aquí se establece es estrictamente suficiente y no necesaria. Más adelante se presentan otras condiciones necesarias conocidas como condiciones Kuhn-Tucker.

1.3 RESTRICCIONES EN FORMA DE DESIGUALDADES

Ahora, se trata una generalización del problema de optimizar una función f sujeta a m restricciones $g_i=0$, $i=1, \dots, m$ donde $f, g_i: \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}$ $i=1, \dots, m$.

Esta generalización consiste en considerar las m restricciones como inecuaciones. Aquí puede suceder que $m < k$, $m = k$ o bien $m > k$, es decir, no se pide que haya alguna relación especial entre el número de restricciones y el número de variables.

En la práctica, este tipo de planteamiento tal vez sea el más utilizado, pues en muchas ocasiones tan sólo se tienen ciertas cotas, tanto inferiores como superiores, con las que se debe cumplir.

Por ejemplo, un problema donde claramente se aprecian este tipo de restricciones es el de la dieta, cuyo planteamiento es el siguiente.

Interesa minimizar el costo de una dieta, la cual debe satisfacer algunos requisitos nutricionales mínimos. Partiendo del supuesto de que se dispone de k distintos productos alimenticios x_1, x_2, \dots, x_k y que a cada x_i se le puede asociar:

- v_i unidades de vitaminas.
- j_i " " minerales.
- h_i " " carbohidratos.
- p_i " " proteínas.
- c_i costo por unidad.

Suponiendo que los niveles nutricionales mínimos son:

$$g_i \geq \alpha_i$$

$$g_2 \geq \alpha_2$$

$$g_3 \geq \alpha_3$$

$$g_4 \geq \alpha_4$$

donde:

g_1 es el contenido total de vitaminas en la dieta.

g_2 " " " " minerales " "

g_3 " " " " carbohidratos " "

g_4 " " " " proteínas " "

y $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ son constantes predeterminadas.

El problema puede plantearse de la siguiente manera:

Si f representa el costo total de la dieta, se debe minimizar f sujeta a:

$$g_1 \geq \alpha_1$$

$$g_2 \geq \alpha_2$$

$$g_3 \geq \alpha_3$$

$$g_4 \geq \alpha_4$$

Esta clase de problemas, con restricciones en forma de inequaciones, se pueden transformar en otros equivalentes, donde las restricciones son ecuaciones y en los que se puede aplicar la teoría de las secciones anteriores. Esto se logra si a cada restricción g_i de la forma $g_i \geq \alpha_i$ ($g_i < \alpha_i$) se le resta (suma) una función de holgura. Aquí se trabaja con funciones de holgura cuadrática.

Para la i -ésima restricción, la función de holgura cuadrática se denota por h_i , $i=1, \dots, n$ y su expresión analítica es

$$h_i = (x_{k+1})^2,$$

en donde x_{k+1} con $i=1, \dots, n$, representan variables auxiliares adicionales.

De esta forma, las nuevas restricciones son

$$g_i^* = g_i - (x_{k+1})^2 = \alpha_i \quad (g_i^* = g_i + (x_{k+1})^2 = \alpha_i) \quad i=1, \dots, n.$$

En este momento se tendrá que aplicar la técnica de Multiplicadores de Lagrange, descrita en la sección anterior, a f y a las restricciones g_i^* con $i=1, \dots, n$.

Para encontrar los puntos críticos, habrá que

resolver el sistema

$$\nabla f = \lambda_1 \nabla g_1 + \lambda_2 \nabla g_2 + \dots + \lambda_n \nabla g_n,$$

donde las ecuaciones

$$\frac{\partial f}{\partial x_j} = \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_j} + \lambda_2 \frac{\partial g_2}{\partial x_j} + \dots + \lambda_n \frac{\partial g_n}{\partial x_j} \quad j=1, \dots, n,$$

en el caso de variables de holgura cuadrática, se transforman en

$$-2\lambda_j x_{k+j} = 0 \quad j=1, \dots, n.$$

Se ilustra a través de un ejemplo.

Ejemplo I.3.1.-

Se desea determinar la posible ubicación del óptimo de la función objetivo.

$$f(x_1, x_2) = x_1 + x_2$$

sujeta a la restricción

$$g(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0.$$

Primero, nótese que el problema sí tiene solución, ya que la función objetivo f es continua y la restricción determina un conjunto compacto en \mathbb{R}^2 . Ahora, para hallar la solución, se hace lo siguiente:

i) Se plantea la restricción en forma de ecuación agregando una función de holgura cuadrática, esto hace que la nueva restricción sea

$$g^*(x_1, x_2, x_3) = g(x_1, x_2) + h_3 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - 1 = 0.$$

ii) Se determina el sistema $\nabla f = \lambda \nabla g^*$, resultando

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} = \lambda \frac{\partial g^*}{\partial x_1} \Leftrightarrow 1 = 2\lambda x_1 \quad (1)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_2} = \lambda \frac{\partial g^*}{\partial x_2} \Leftrightarrow 1 = 2\lambda x_2 \quad (2)$$

$$\frac{\partial f}{\partial x_3} = \lambda \frac{\partial g^*}{\partial x_3} \Leftrightarrow 0 = 2\lambda x_3 \quad (3)$$

iii) Se resuelve el sistema para encontrar los puntos críticos.

De (1) (2) y (3) se obtiene que

$$\lambda = 0, \quad x_1 = x_2, \quad x_3 = 0.$$

Sustituyendo en g^*

$$2(x_1)^2 = 1$$

$$\Leftrightarrow x_1 = \pm \sqrt{1/2} = x_2.$$

Por lo tanto, las dos soluciones son $(1/\sqrt{2}, 1/\sqrt{2})$ y $(-1/\sqrt{2}, -1/\sqrt{2})$. Después de evaluar estos puntos en la función objetivo, se puede deducir que la primera solución corresponde a un máximo y la segunda a un

mínimo de f .

Para profundizar mas en el material de esta sección se puede consultar Chow (1962).

I.4 CONDICIONES NECESARIAS (ANALISIS DE PUNTOS CRITICOS)

Una vez que se han obtenido los puntos críticos, surge la necesidad de determinar su naturaleza, es decir, decidir si en realidad los puntos corresponden a valores máximos, mínimos o bien si son puntos silla de la función. La manera mas natural de hacerlo es evaluando la función objetivo en algunos puntos que pertenezcan a una vecindad del punto crítico que se quiere analizar y basandose en la comparación de dichas evaluaciones obtener alguna conclusión. Sin embargo, proceder así tiene dos objeciones principales:

1) Tal vez no sea fácil evaluar la función objetivo y

2) Podría darse el caso que aun evaluando en varios elementos de la vecindad no se tuviera la información suficiente para poder determinar que clase de punto es el analizado.

Por las razones anteriores es que surge la necesidad de encontrar otros caminos para resolver este problema.

En capítulos posteriores se verá que existen métodos muy eficientes, como es el caso de la Transformación Canónica, que sirven para resolver el problema de determinar la naturaleza de los puntos críticos. Por el momento se enunciara, sin demostrar, un criterio necesario pero no suficiente, para la optimalidad de funciones con restricciones.

Dicho criterio se conoce como Condiciones de Kuhn-Tucker y se puede aplicar a problemas de maximización (minimización) sujetos a más de una restricción en forma de inecuaciones.

Suponga entonces que se desea minimizar $f(x)$

Sujeto a

$$g_i(x) \leq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

Si el valor que corresponde al mínimo existe y se encuentra en x^* , deben satisfacerse las siguientes condiciones:

$$i) \nabla F(x^*) = 0$$

donde F es la función de Lagrange, es decir,

$$F = f + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(x)$$

$$ii) g_i(x^*) \leq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iii) (\lambda_i) g_i(x^*) = 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iv) \lambda_i \geq 0.$$

Es importante notar la forma en que se plantea el problema y el sentido de las implicaciones. Las condiciones para los 3 casos restantes que pueden darse en la práctica son:

1) Cuando se desea maximizar $f(x)$ sujeto a

$$g_i(x) \leq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

debe cumplirse

$$i) \nabla F(x^*) = 0$$

$$ii) g_i(x^*) \leq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iii) (\lambda_i) g_i(x^*) = 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iv) \lambda_i \leq 0.$$

2) Si el problema fuera minimizar $f(x)$ sujeta a

$$g_i(x) \geq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

Entonces x^* es el punto buscado si

$$i) \nabla F(x^*) = 0$$

$$ii) g_i(x^*) \geq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iii) (\lambda_i) g_i(x^*) = 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iv) \lambda_i \leq 0.$$

Finalmente para el caso en que se desea maximizar $f(x)$ sujeta a

$$g_i(x) \geq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

Las condiciones están dadas por

$$i) \nabla F(x^*) = 0$$

$$ii) g_i(x^*) \leq 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iii) (\lambda_i) g_i(x^*) = 0 \quad \forall i=1, \dots, m$$

$$iv) \lambda_i \geq 0.$$

También se requiere que los puntos críticos sean

accesibles. Un punto x_0 es accesible en una región R , n -dimensional, si $x_0 \in \text{Int}(R)$ (el interior de R), o bien si $x_0 \in \partial(R)$ (la frontera de R) y se pueden efectuar desplazamientos infinitesimales tales que el punto desplazado se convierta en un punto interior de R .

Como las condiciones son necesarias y no suficientes, la manera en que debe emplearse este criterio es negando matemáticamente las hipótesis dadas para así eliminar a los puntos que no son óptimos.

Se finaliza esta sección mostrando un ejemplo en el cuál la función objetivo está sujeta a una restricción, presentada en forma de desigualdad (que como se vio es el caso mas general que se pueda resolver con el método de los Multiplicadores de Lagrange) y en el que se hará uso de las condiciones Kuhn-Tucker.

Ejemplo I.4.1 (Wismer (1978))

minimizar $(x-a)^2 + b$ sujeto a $x - c \geq 0$

Entonces

$$F = (x - a)^2 + b + \lambda (x - c).$$

Luego

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 2(x - a) + \lambda = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = x - c \geq 0$$

Por los puntos 3 y 4 de las condiciones Kuhn-Tucker también se tiene

$$\lambda(x - c) = 0$$

$$\lambda \leq 0.$$

Finalmente

$x = c$ es una solución

$$\lambda = -2(x - a) = 2(a - x)$$

o bien

$$\lambda = 0$$

$x = a$ es la solución

Si $a < c$, la solución será $x = c$, pues $\lambda = 2(a - c) < 0$

Por lo tanto, si se toman puntos que no cumplan estas condiciones, con seguridad no serán mínimos

restringidos. Para la persona interesada en estudiar mas a fondo las condiciones Kuhn-Tucker se puede consultar Beale (1988), Boizan (1988) y Wismer (1987).

BIBLIOGRAFIA DEL CAPITULO

- Apostol, T.M. (1967). *Calculus*, 2nda ed., Vol.2, Reverté.
- Beale, E.M.L. (1988). *Introduction to Optimization*, New York: John Wiley.
- Boizan, M.A. (1988). *Optimización*, Pueblo y Educación.
- Chow, W.M. (1962). A Note on the Calculation of Certain Constrained Maxima, *Technometrics*, 4, 135-137.
- Courant, R. y F. John (1972). *Introducción al Cálculo y al Análisis Matemático Vol. II*, Limusa.
- Marsden, J.E. y A.J. Tromba (1981). *Cálculo Vectorial*, Fondo Educativo Interamericano S.A.
- Umland, A.W. y W.W. Smith (1959). The Use of Lagrange Multipliers with Response Surfaces, *Technometrics*, 1, 289.
- Wismer, D.A. y R. Chattergy (1978). *Introduction to Nonlinear Optimization*, New York: North Holland.

CAPITULO II

ANALISIS CANONICO

INTRODUCCION

Uno de los objetivos que se persiguen en el trabajo experimental es medir la relación entre las variables independientes y una o más variables de respuesta.

Un problema muy frecuente para el experimentador, es determinar bajo qué niveles las variables independientes proporcionan una respuesta óptima, es decir, una respuesta máxima o mínima.

Este estudio se puede lograr con la ayuda de un modelo matemático que relacione las variables dependientes con las independientes. El modelo se construye o se "ajusta" utilizando un diseño de experimentos y de aquí se obtiene un óptimo estimado. (Existen métodos que no requieren de dicho ajuste como es el caso de las Tangentes Paralelas que se plantea en el capítulo V).

Cualquier investigador sensato trataría de obtener su ajuste usando una zona experimental donde se encuentre el óptimo. La elección de esta depende en gran medida del conocimiento previo que del problema tenga el investigador.

El Análisis Canónico (A.C.) es el segundo método de optimización en superficie de respuesta que se presenta en este trabajo y es sobre el que se discutirá en éste capítulo. El objetivo principal es la localización de óptimos para cuando la media de la superficie de respuesta tiene la forma

$$\beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^k \beta_{ij} x_i x_j$$

es decir, cuando es de segundo orden. Aquí se supondrá que se ha escogido una región experimental donde posiblemente se encuentre un óptimo.

La técnica de A.C., no sólo se concretará a

calificar a los puntos críticos (máximos, mínimos o puntos silla), sino a hacer un análisis de la superficie en vecindades del punto de interés. En el caso que se detecte un óptimo fuera de la región de diseño, se tratará de aprovechar la información dada por A.C. en vías de obtener una nueva región con mayores posibilidades de tener óptimos.

II.1 EL ANALISIS CANONICO

Supóngase que ya se dispone de una región experimental de manera que sea factible que el óptimo esté en ella y además, se considera adecuado ajustar un modelo de segundo orden.

Un modelo de este tipo se puede utilizar por las siguientes razones:

i) Cualquier superficie sin "picos" se puede aproximar mediante un polinomio de varias variables, según el teorema de Taylor.

ii) Cualquier superficie cercana a un óptimo tiene un comportamiento cuadrático.

Recuérdese que la respuesta media tiene la forma

$$\eta = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^k \beta_{jm} x_j x_m + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2$$

y después de realizado el ajuste la respuesta estimada \hat{Y} está dada por la ecuación

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{j=1}^k \sum_{m=1}^k b_{jm} x_j x_m + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2,$$

donde b_j es el estimador por mínimos cuadrados de β_j . El objetivo será maximizar \hat{Y} en términos de x_1, \dots, x_k .

Adicionalmente se supone que \hat{Y} es un buen ajuste de η . Esto quiere decir que η esta bien aproximada por \hat{Y} . Puesto que η es lineal en los parámetros, se puede aplicar la teoría para el modelo de regresión lineal general en vías de verificar la calidad del ajuste. (Draper y Smith (1982)).

\hat{Y} puede expresarse en forma matricial como

$$\hat{Y} = b_0 + \underline{x}^t \underline{b} + \underline{x}^t \underline{B} \underline{x} \quad (\text{II.1.1})$$

donde

$$\underline{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} \quad \underline{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} \quad \underline{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & & b_{1k}/2 \\ & b_{22} & & b_{2k}/2 \\ & & \dots & \\ \text{sim} & & & b_{k-1k}/2 \\ & & & b_{kk} \end{bmatrix}$$

y \underline{x}^t denota al vector \underline{x} transpuesto.

Puesto que la función \hat{Y} es derivable sobre todo R^k , si existe un máximo o un mínimo, ya sea local o global, se encontrará entre los puntos tales que $\nabla \hat{Y} = 0$.

Los puntos que satisfacen esta última condición son conocidos como puntos críticos o puntos estacionarios de la superficie ajustada. El término estacionario se debe a que \hat{Y} no cambia cuando \underline{x} experimenta cambios pequeños. De esto que el primer paso en la técnica A.C. es localizar los puntos críticos.

No todo punto estacionario está forzado a ser un óptimo y a los puntos estacionarios que no son óptimos se les denomina puntos silla.

Para obtener los puntos estacionario primero se calcula $\partial \hat{Y} / \partial \underline{x}$ (que denota a $\nabla \hat{Y}$ como un vector columna) y usando que la derivada es un operador lineal, se tiene

$$\partial \hat{Y} / \partial \underline{x} = \partial(b_0) / \partial \underline{x} + \partial(\underline{x}^t \underline{b}) / \partial \underline{x} + \partial(\underline{x}^t \underline{B} \underline{x}) / \partial \underline{x}.$$

Note que cada una de las derivadas introducidas en esta expresión de $\partial \hat{Y} / \partial \underline{x}$ tienen sentido, ya que su argumento está dado por funciones escalares.

Se tiene que

$$\partial(b_0) / \partial x_i = 0 \quad \forall i=1, \dots, k, \text{ entonces } \partial(b_0) / \partial \underline{x} = 0.$$

$$\partial(\underline{x}^t \underline{b}) / \partial x_i = \partial\left(\sum_{j=1}^k x_j b_j\right) / \partial x_i = b_i \text{ entonces}$$

$$\partial(\underline{x}^t \underline{b}) / \partial \underline{x} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} = \underline{b}$$

$$\begin{aligned} \partial(\underline{x}^t \underline{B} \underline{x}) / \partial x_i &= \partial \left(\sum_{j=1}^k \sum_{n=1}^k b_{jn} x_j x_n + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 \right) / \partial x_i \\ &= \partial \left(\sum_{j=1}^k \sum_{n=1}^k b_{jn} x_j x_n \right) / \partial x_i + \partial \left(\sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 \right) / \partial x_i \\ &= \sum_{j=1}^{i-1} b_{ji} x_j + \sum_{n=1}^k b_{in} x_n + 2b_{ii} x_i. \end{aligned}$$

Puesto que la matriz B es simétrica, entonces $b_{ij} = b_{ji}$ y

$$\partial(\underline{x}^t \underline{B} \underline{x}) / \partial x_i = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j + \sum_{n=1}^k b_{in} x_n + 2b_{ii} x_i.$$

Haciendo un cambio de índice en el segundo término se tiene que

$$\partial(\underline{x}^t \underline{B} \underline{x}) / \partial x_i = \sum_{j=1}^i b_{ij} x_j + \sum_{j=1}^k b_{ij} x_j + 2b_{ii} x_i$$

que es la entrada i -ésima del vector $2B\underline{x}$.

Por lo tanto

$$\partial(\underline{x}^t \underline{B} \underline{x}) / \partial \underline{x} = 2B\underline{x}.$$

Con estas tres expresiones resulta que

$$\hat{\partial Y} / \partial \underline{x} = \underline{b} + 2B\underline{x}. \quad (\text{II.1.2})$$

Igualando la expresión II.1.2 con cero se obtienen los puntos estacionarios, entonces

$$\hat{\partial Y} / \partial \underline{x} = \underline{b} + 2B\underline{x} = 0$$

$$\bullet \quad \underline{x}_0 = -B^{-1} \underline{b} / 2$$

siempre que B^{-1} exista.

Si B^{-1} no existe, el problema no tiene solución o tiene una infinidad de soluciones. En este caso habría que verificar, de acuerdo con el contexto del problema, si es correcto pensar en la inexistencia del óptimo o en su falta de unicidad. De no ser así, el error se deberá a la propuesta del modelo o al diseño usado para

construirlo.

Cuando x_0 es un óptimo muchas veces es de interés conocer la dirección de menor o mayor decremento, ya que en una situación real el punto óptimo obtenido podría ser inaceptable por cuestiones presupuestales. En este caso, se buscaría algún punto que tuviera asociada una respuesta con aproximadamente el mismo valor y además que se considerara aceptable.

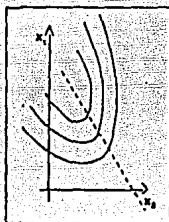
Cuando se tiene un punto silla, puede suceder que la verdadera relación entre la respuesta y las variables independientes presente dos óptimos. En este caso sería de interés, detectar en qué dirección se encuentran dichos óptimos. (las direcciones de mayor o menor decremento de la superficie).

Otra situación que puede ocurrir en la práctica es la siguiente.

FIGURA II.1.1



FIGURA II.1.2



La figura II.1.1, muestra lo que se conoce como sistema de cordillera estacionaria, mientras que la fig.II.1.2. muestra uno de cordillera ascendente. El primer caso determina que hay una región, más que un punto, en donde la respuesta se maximiza o se minimiza (aquí B^{-1} no existe). Dicha región, proporciona condiciones alternativas para optimalidad.

La cordillera ascendente indica la dirección en la cual el investigador debe mover la zona experimental, para obtener un óptimo que esté dentro de dicha región.

Los sistemas de cordilleras serán estudiados con mayor detalle en el capítulo IV. Por ahora sólo se destaca el valor que su estudio tiene para hacer nuevas experimentaciones.

Con esto en mente, se discute una estrategia para caracterizar a x_0 . Una forma de lograr esto podría ser aplicar la teoría que el cálculo diferencial en varias variables ha desarrollado, específicamente los criterios apoyados en el Hessiano.

La matriz 2B contiene la información referente a las derivadas de segundo orden de la superficie \hat{Y} . Esta matriz se conoce como Hessiana y con ella se puede detectar la naturaleza del punto x_0 . Si la matriz Hessiana es definida positiva, entonces la función tiene un mínimo en x_0 , si la matriz Hessiana es definida negativa la función tiene un máximo en x_0 .

Resolver de este modo el problema podría presentar entre otras, las siguientes dificultades.

- i) A medida que el número de variables crece, el cálculo del Hessiano es cada vez más difícil y
- ii) No se puede analizar el comportamiento de la función \hat{Y} en las cercanías del punto x_0 .

Por otro lado, es recomendable que en caso de trabajar con tres o menos variables independientes, se grafiquen las curvas de nivel con valores cercanos a $\hat{Y}(x_0)$, pues así se puede obtener información adicional.

El método propuesto aquí, que es conocido como Método de la Transformación Canónica (MTC), permitirá hacer el análisis deseado, sin importar el número de variables independientes.

El MTC consiste, primero, en trasladar los ejes coordenados, en donde las variables son x^i , a un nuevo origen que se ubica en $x_0 = -B^{-1}b/2$, obteniendo así la siguiente expresión

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + \underline{z}^t B \underline{z} \quad .$$

donde

$$\hat{Y}_0 = \hat{Y}(x_0) = b_0 + \underline{x}^t b + \underline{x}_0^t B \underline{x}_0 \quad (II.1.3)$$

$z + x_0 = x$, es decir, las z son las variables correspondientes a los ejes trasladados.

La ecuación II.1.3 se obtuvo sustituyendo $z+x_0$ en lugar de x en la ecuación (II.1.2), así

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= b_0 + (z+x_0)'b + (z+x_0)'B(z+x_0) \\ &= b_0 + (z'+x_0')b + (z'+x_0')B(z+x_0) \\ &= b_0 + z'b + x_0'b + z'B(z+x_0) + x_0'B(z+x_0) \\ &= b_0 + z'b + x_0'b + z'Bz + z'Bx_0 + x_0'Bz + x_0'Bx_0 \\ &= (b_0 + x_0'b + x_0'Bx_0) + z'b + z'Bz + z'Bx_0 + x_0'Bz \\ &= \hat{Y}_0 + z'b + z'Bz + z'Bx_0 + x_0'Bz \end{aligned}$$

Nótese que tanto $z'Bx_0$ como $x_0'Bz$ son números reales y si $\alpha \in \mathbb{R}$, entonces $\alpha' = \alpha$. Además, B es una matriz simétrica, por tanto

$$(z'Bx_0)' = x_0'Bz = x_0'Bz$$

quedando

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + z'b + z'Bz + 2z'Bx_0.$$

Sustituyendo el valor $x_0 = -B^{-1}b/2$ se tiene

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= \hat{Y}_0 + z'b + z'Bz + 2z'B(-B^{-1}b/2) \\ &= \hat{Y}_0 + z'b + z'Bz - z'b \\ &= \hat{Y}_0 + z'Bz. \end{aligned} \quad (\text{II.1.4})$$

Al hacer la traslación de los ejes al punto x_0 , se transforma el modelo original en uno equivalente, que tiene una forma analítica mas sencilla, en la cual no aparecen términos lineales.

La segunda parte de la Transformación Canónica se logra recordando que bajo una rotación adecuada se pueden eliminar de la ecuación (II.1.4) todos los productos cruzados $z_i z_j \forall i \neq j$ y de esta manera llegar a una expresión con la forma

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2.$$

Con ella será mas fácil saber si en realidad el punto estacionario x_0 corresponde a un máximo, a un mínimo o a un punto silla. Además, las variables w^i determinarán los ejes principales de las curvas de

nivel de la función de respuesta.

A continuación se detalla la manera de obtener dicha rotación.

Se determinan los valores propios (también conocidos como valores característicos o eigenvalores) de la matriz B. Para ello se encuentran las raíces del polinomio característico en λ ($P(\lambda)$) que resulta de calcular el determinante de la matriz $(B - \lambda I_k)$. Como B es una matriz cuyos elementos son reales, entonces todos sus valores propios son reales.

A medida que el número de variables del modelo sea mayor, aumentará la dificultad para obtener los valores propios de B, ya que el grado del polinomio $P(\lambda)$ crecerá y por consiguiente será más difícil encontrar sus raíces.

Una vez que se hayan obtenido los k valores propios se sigue un procedimiento apoyado sobre el siguiente teorema.

TEOREMA II.1

Si $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ son valores propios, todos reales, de una matriz simétrica B, existe una transformación ortogonal $\underline{z} = M\underline{w}$ tal que la forma cuadrática $Q = \underline{x}^t B \underline{x}$ es transformada a la expresión canónica.

$$\lambda_1 w_1^2 + \lambda_2 w_2^2 + \dots + \lambda_k w_k^2$$

Esto es, la forma cuadrática Q es transformada a otra cuya matriz es diagonal y los elementos de la diagonal son los valores propios de la matriz B. La i-ésima columna de la matriz M es el vector propio asociado al valor propio λ_i . La matriz M existe porque para λ_i diferentes sus correspondientes vectores propios son ortogonales debido a la simetría de B y para cada λ_i con multiplicidad j, existen j vectores propios ortogonales.

A continuación se muestra cómo llegar a la forma cuadrática partiendo de que ya se tiene a la matriz M.

Se sabe que $M = [m_1, m_2, \dots, m_k]$ es ortogonal, es decir, $M^t M = I_k$. m_i denota la i-ésima columna de la

matriz M.

Sea $\underline{z} = M\underline{w}$ (o bien $\underline{w} = M^t \underline{z}$) la transformación ortogonal. Si se sustituye en la ecuación II.1.4 se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{Y} &= \hat{Y}_0 + (M\underline{w})^t B(M\underline{w}) \\ &= \hat{Y}_0 + \underline{w}^t M^t B M \underline{w} \\ &= \hat{Y}_0 + \underline{w}^t \begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{12} \\ \vdots \\ m_{1k} \end{bmatrix} [\lambda_1 m_{11}, \lambda_2 m_{12}, \dots, \lambda_k m_{1k}] \underline{w} \\ &= \hat{Y}_0 + \underline{w}^t \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & \\ & & \dots & \\ & & & \lambda_k \end{bmatrix} \underline{w} \\ &= \hat{Y}_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 \end{aligned} \quad (\text{II.1.5})$$

que es la forma a la que se deseaba llegar. La obtención de M se ilustrará mediante un ejemplo.

Ahora se analizará la ecuación II.1.5 por casos para poder especificar la naturaleza del punto estacionario. De aquí en adelante se supone que el punto estacionario está dentro de la región experimental, a menos que se indique lo contrario.

CASO 1.

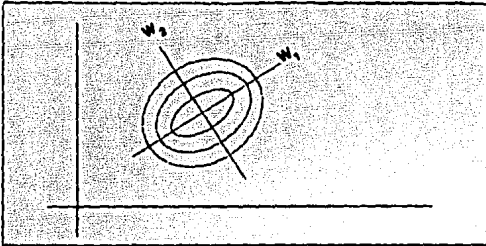
Si en la ecuación II.1.5 $\lambda_i < 0 \quad \forall \quad i=1, \dots, k$, entonces \underline{x}_0 corresponde a un valor máximo de \hat{Y} , pues

$$\begin{aligned} \lambda_i w_i^2 &< 0 \quad \forall \quad i=1, \dots, k \\ &+ \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 < 0 \\ &= \hat{Y}_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 < \hat{Y}_0 = \hat{Y}(\underline{x}_0) \end{aligned}$$

Es decir, cualquier movimiento que se realice a partir de \underline{x}_0 , sin importar la magnitud de éste, provocará un decremento en \hat{Y} .

Si $k=2$ las curvas de nivel, en términos de las variables w^s , se verán como en la figura II.1.3.

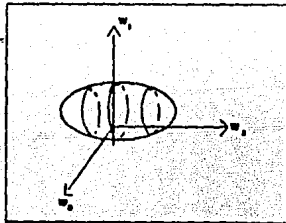
FIGURA II.1.3



Si $|\lambda_2|$ es considerablemente mayor que $|\lambda_1|$, en la dirección del eje w_2 hay un decremento más acelerado de la respuesta comparado con el descenso ocurrido al avanzar sobre w_1 . Esto provoca que las curvas de nivel se alarguen en la dirección de w_1 .

Cuando $k=3$ las superficies de nivel presentan la forma que en la figura II.1.4. aparece. Igualmente se pueden comparar las magnitudes $|\lambda_i|$ dos a dos y ver hacia dónde se alargan las superficies.

FIGURA II.1.4



En general, $|\lambda_i|$ mide la magnitud de decrecimiento de la respuesta \hat{y} en la dirección w_i .

Caso 2.

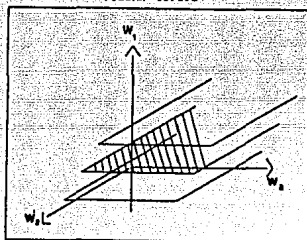
Suponga que en II.1.5 existe al menos un subíndice $j \in \{1, \dots, k\}$ tal que λ_j es aproximadamente cero y además que $\lambda_i < 0 \forall i=1, \dots, k$, entonces \underline{x}_j nuevamente corresponde a un valor máximo \hat{y} , pero en

terminos prácticos no es único, sino que habrá una infinidad de puntos que aproximadamente dan el valor máximo de \hat{Y} , todos ellos en el hiperplano determinado por las w_j 's tales que sus correspondientes λ_j 's son casi cero. Cuando se encuentran estos casos, se dice que hay una cordillera estacionaria.

Para $k=2$ y en el límite, es decir, cuando $\lambda_1=0$, $\lambda_2 < 0$ la región de posibles máximos tiende a una recta (ver figura II.1.1). Cuando se está cerca de dicho límite, al desplazarse sobre el eje w_1 no hay cambios significativos en la respuesta \hat{Y} según la ecuación II.1.5.

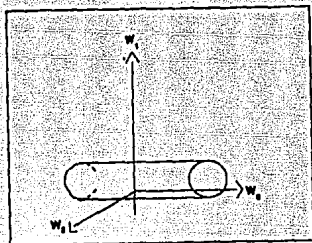
Para $k=3$, cuando $\lambda_2=\lambda_3=0$, $\lambda_1 < 0$, se tiene un plano (figura II.1.5).

FIGURA II.1.5



Cuando $\lambda_1, \lambda_2 < 0$, $\lambda_3=0$ la región de posibles máximos tiende a ser el eje w_3 encerrado por curvas de nivel en forma de cilindro. (ver figura II.1.6).

FIGURA II.1.6



La importancia de hacer $\lambda_j = 0$ radica en la facilidad para entender los casos en que λ_j es muy cercana a cero. Para hacer Análisis Canónico se requiere que B^{-1} exista que ocurre si y solo si todos sus valores propios son diferentes de cero. (Friedberg, Insel, Spence (1982).

Caso 3

Si en la ecuación II.1.5, $\lambda_i > 0 \quad \forall i=1, \dots, k$, entonces \underline{x}_0 corresponde a un mínimo de \hat{Y} , pues

$$\begin{aligned} \lambda_i w_i^2 &> 0 \quad \forall i=1, \dots, k \\ &\bullet \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 > 0 \\ &\bullet \hat{Y}_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2 > \hat{Y}_0 \end{aligned}$$

Aquí el análisis es similar al caso 1.

Caso 4

Si en la ecuación II.1.5 existe al menos un subíndice $j \in \{1, \dots, k\}$ tal que λ_j es aproximadamente cero y $\lambda_i > 0 \quad \forall i=1, \dots, k$, entonces se tiene una cordillera estacionaria formada por elementos correspondientes al mínimo de \hat{Y} . Nuevamente, aquí se pueden escoger los puntos que mas convengan.

Caso 5.

Si en la ecuación II.1.5 hay algún(os)

valor(es) propio(s) positivo(s) y otro(s) negativo(s), entonces x_0 es un punto silla. Esto quiere decir que a partir de x_0 , existen direcciones en las que al desplazarse, la función \hat{Y} crece, pero también existen otras direcciones en las cuales \hat{Y} decrece.

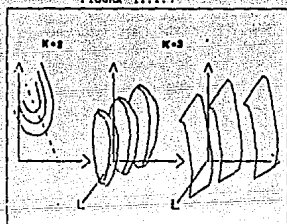
Si fuera de interés, por ejemplo, obtener el punto que corresponde al máximo, se debería avanzar sobre las direcciones en las que \hat{Y} crece. Se conocen dichas direcciones en términos de las variables w^i , gracias a la ecuación II.1.5. Para saber cuáles son sus equivalentes en las variables x^i se utiliza la relación $\underline{x} + x_0 = z = Mw$.

Para terminar el Análisis Canónico, se consideran los casos donde el punto estacionario está alejado de la región experimental en que se ajustó el modelo.

Se dice que se tiene una cordillera ascendente (descendente) cuando x_0 corresponde a un valor máximo (mínimo) de \hat{Y} , pero con la particularidad de que existe al menos un subíndice $j \in \{1, \dots, k\}$ tal que λ_j es casi cero.

Los casos mas comunes de este tipo de cordilleras en forma gráfica, son las siguientes:

FIGURA II.1.7



Donde lo que se recomienda es desplazarse sobre el eje w_i , siempre que $|\lambda_i|$ tienda a cero, para así poder determinar nuevas zonas de experimentación.

Cuando se está en este tipo de casos, debe volver a desarrollarse todo el procedimiento antes descrito

seleccionar la región de experimentación, ajustar un nuevo modelo de segundo orden, obtener el punto estacionario correspondiente y finalmente bajo una determinar la naturaleza del punto estacionario, usando la ecuación II.1.5.

Teóricamente, este algoritmo debe emplearse hasta que el punto estacionario que se obtenga sea un máximo (mínimo), aunque en la práctica el costo y el tiempo limitan el número de experimentos posibles.

Se finaliza el capítulo con un ejemplo de la técnica explicada.

Ejemplo II.1.4 (Myers (1971))

Este ejemplo involucra un experimento en donde un investigador trata de analizar la influencia de la temperatura de sellado (x_1), la temperatura de la barra que enfría (x_2) y el porcentaje de polietileno aditivo (x_3) sobre la fuerza de sellado en gramos por pulgada del empaquetado para pan de caja.

Las variables originales fueron codificadas utilizando las formulas

$$X_1 = \frac{\text{TEMP. SELLADO} - 255}{30}$$

$$X_2 = \frac{\text{TEMP. DE ENFRIAMIENTO} - 55}{9}$$

$$X_3 = \frac{\text{X DE POLIETILENO} - 1.1}{0.6}$$

Fueron usados en el diseño experimental cinco diferentes niveles para las variables. Los niveles para las variables codificadas y originales están dadas en la tabla II.1.

TABLA II.1

	-1.682	-1.000	0.000	1.000	1.682
X1	204.5	225	255	285	305.5
X2	39.9	46	55	64	70.1
X3	0.09	0.5	1.1	1.7	2.11

La matriz del diseño, originada de un diseño compuesto central, diseños considerados adecuados para ajustar una superficie de segundo orden (Myers (1971) Cap. 7) y el vector de observaciones Y en variables

codificadas son

	X1	X2	X3		
D=	-1	-1	-1	1	6.6
	1	-1	-1	1	6.9
	-1	1	-1	1	7.9
	1	1	-1	1	6.1
	-1	-1	1	1	9.2
	1	-1	1	1	6.8
	-1	1	1	1	10.4
	1	1	1	1	7.3
	-1.682	0	0	0	9.8
	1.682	0	0	0	5.0
	0	-1.682	0	0	6.9
	0	1.682	0	0	6.3
	0	0	-1.682	0	4.0
	0	0	1.682	0	8.6
	0	0	0	0	10.1
	0	0	0	0	9.9
	0	0	0	0	12.2
	0	0	0	0	9.7
	0	0	0	0	9.7
	0	0	0	0	9.6

Para el modelo de segundo orden

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^3 b_{1i}x_i + \sum_{i=1}^3 b_{2i}x_i^2 + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 b_{3ij}x_i x_j$$

la matriz X es

	X1	X2	X3	X1 ²	X2 ²	X3 ²	X1X2	X1X3	X2X3
1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1
1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
1	-1	1	-1	1	1	1	-1	1	-1
1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1
1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1
1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1
1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	-1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	0
1	1.682	0	0	2.828	0	0	0	0	0
1	0	-1.682	0	0	2.828	0	0	0	0
1	0	1.682	0	0	2.828	0	0	0	0
1	0	0	-1.682	0	0	2.828	0	0	0
1	0	0	1.682	0	0	2.828	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Se estimarán los parámetros por por mínimos

cuadrados. Resolviendo las ecuaciones normales dadas por

$$(X'X)\hat{\beta} = X'Y,$$

con $\hat{\beta}' = [b_0, b_1, b_2, b_3, b_{11}, b_{22}, b_{33}, b_{12}, b_{13}, b_{23}]$, se tiene que,

$$\hat{Y} = 10.1657 - 1.103x_1 + 0.08272x_2 + 1.0206x_3 - 0.7602x_1^2 - 1.430x_2^2 - 1.149x_3^2 - 0.3500x_1x_2 - 0.500x_1x_3 + .1500x_2x_3.$$

Se presenta la tabla de Análisis de Varianza (incluido el renglón correspondiente a Carencia de Ajuste).

FUENTE	SUMA CUAD.	G. DE LIB.	CUAD. MED	F
REGRESION	70.3056	9	7.8117	
ERROR	11.8644	10	1.1864	7.87
CARENCIA DE AJ.	6.9044	5	1.3809	
ERROR PURO	4.9600	5	.9920	1.39
TOTAL	82.1700	19		

Consultando tablas de F para las correspondientes grados de libertad se puede concluir que el modelo es adecuado.

Se calculó el punto estacionario utilizando la ecuación

$$\underline{x_0} = -B^{-1}b/2$$

llegando a que

$$\underline{x_0} = \begin{bmatrix} x_1, 0 \\ x_2, 0 \\ x_3, 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.0098 \\ 0.2602 \\ 0.6808 \end{bmatrix}$$

con respuesta estimada $\hat{y}_0 = 11.08$.

Para calcular las raíces características de la matriz B, $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$, se utiliza la ecuación

$$\begin{vmatrix} (-0.7602 - \lambda) & -0.1750 & -0.2500 \\ -0.1750 & (-1.043 - \lambda) & 0.0750 \\ -0.2500 & 0.0750 & (-1.1491 - \lambda) \end{vmatrix} = 0,$$

de donde las raíces son

$$\lambda_1 = -0.5630 \quad \lambda_2 = -1.2712 \quad \lambda_3 = -1.1172,$$

dando lugar a la forma canónica

$$\hat{Y} = 11.08 - 0.5630w_1^2 - 1.2712w_2^2 - 1.1172w_3^2.$$

Puesto que todas las λ_i 's son negativas, el punto

estacionario es un máximo. Nótese que este punto estacionario está dentro de la región experimental y que las curvas de nivel de la respuesta se alargan en dirección del eje w_1 que corresponde al valor propio con valor absoluto más pequeño. La respuesta es igualmente sensitiva en cambios a lo largo de los ejes w_2 y w_3 ya que $|\lambda_2| = |\lambda_3|$.

Algo que puede resultar de interés para el investigador es conocer la relación entre las variables w 's y las variables x 's. Recuerdese que $\underline{z} = M\underline{w}$.

Para encontrar la columna M_i de la matriz M , debe resolverse el sistema de ecuaciones $(B - \lambda_i I_k)M_i = 0$.

m_{ij} denotará el elemento en el i -ésimo renglón y en la j -ésima columna de M . Para $\lambda_1 = -.5630$ se tiene que

$$\begin{bmatrix} (b_{11} + 0.5630) & b_{12}/2 & b_{13}/2 \\ b_{12}/2 & (b_{22} + .5630) & b_{23}/2 \\ b_{13}/2 & b_{23}/2 & (b_{33} + .5630) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_{11} \\ m_{21} \\ m_{31} \end{bmatrix} = 0$$

Al resolver el sistema las soluciones deben ser normalizadas, por ejemplo para M_i debe ocurrir que

$$m_{11}^2 + m_{21}^2 + m_{31}^2 = 1.$$

La forma de resolver estas ecuaciones es dar un valor arbitrario a una de las incógnitas reduciendo la dimensión del sistema. Se puede sustituir $m'_{31} = 1$ en m_{31} y obtener las soluciones $m'_{11} = -2.0791$ $m'_{21} = .9142$.

Es fácil verificar que siempre que se dé un valor a m_{31} diferente de cero, se pueden encontrar m_{21} y m_{11} que sean solución al sistema. Esto se debe a que las ecuaciones que se desean resolver determinan un subespacio de dimensión 1 generado por un vector con tercera componente distinta de cero. De aquí que las soluciones no sean únicas.

Para la solución m'_{31} , m'_{21} , m'_{11} , los valores m_{31} , m_{21} , m_{11} se obtienen dividiendo m'_{31} , m'_{21} y m'_{11} entre

$$\sqrt{(m'_{11})^2 + (m'_{21})^2 + (m'_{31})^2} = \sqrt{6.1584}$$

dando como resultado

$$m_{11} = -.8378, \quad m_{21} = 0.3684, \quad m_{31} = 0.4030.$$

Se puede aplicó el mismo procedimiento para λ_1 y λ_3 , resultando M igual a

$$M = \begin{bmatrix} -.8378 & 0.4535 & -0.3052 \\ .3684 & 0.0552 & -0.9281 \\ 4030 & 0.8895 & 0.2132 \end{bmatrix}$$

Recuérdese que ya no hay que verificar que las columnas de M sean ortogonales. Esto se garantiza usando que si $\lambda_i \neq \lambda_j$, los vectores propios correspondientes a estos valores propios, son ortogonales.

Finalmente la relación entre las w 's y las x 's, está dada por

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -.83780, 4535-0.3052 \\ .36840, 0552-0.9281 \\ .40300, 8895 \quad 0.2132 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1+1.0098 \\ x_2-0.2602 \\ x_3-0.6808 \end{bmatrix}$$

Si x_0 representa condiciones de costo muy elevadas se pueden encontrar vectores x que den casi la misma respuesta y no sean tan caros. Esto se logra de la siguiente manera .

Al observar la ecuación

$$\hat{Y} = 11.08 - 0.5630w_1^2 - 1.2712w_2^2 - 1.1172w_3^2 .$$

se nota que al desplazarse sobre alguno de los ejes w_1 , w_2 o w_3 a partir del punto $(0,0,0)$, la respuesta decrece menos sobre la dirección de w_1 . Así que si se dan valores a w_1 cercanos a cero y se consideran vectores de la forma $(w_1, 0, 0)$ con sus correspondientes (x_1, x_2, x_3) , los vectores con entradas x 's son máximos aproximados. Dentro de estos últimos se seleccionan los mas adecuados. La tabla II.2 presenta algunos máximos aproximados.

TABLE 11.2

MI	.1	.2	.3	.4	.5
X1	-1.093	-1.1773	-1.2611	-1.3449	-1.4287
X2	.2970	.3338	.3707	.40756	.4444
X3	.7211	.7611	.8017	.8420	.8823
Y	11.074	11.057	11.029	10.989	10.939

BIBLIOGRAFIA DEL CAPITULO

- Anderson, V.L. y R.A. McLean (1974). *Design of Experiments: A Realistic Approach*, New York: Marcel Dekker.
- Box, G.E.P. (1964). *An Introduction to Response Surface Methodology*, Technical Report 33, Department of Statistics, University of Wisconsin, Madison, Wis.
- Box, G.E.P., W.G. Hunter y J.S. Hunter (1978). *Statistics for Experimenters*, New York: John Wiley.
- Draper, N.R. y H. Smith (1981). *Applied Regression Analysis*, 2nda Ed., New York: John Wiley.
- Friedberg, S.H., A.J. Insel y L.E. Spence (1982). *Algebra Lineal*, 1era. Ed., Publicaciones Cultural S.A.
- Khuri, A.I. y J.A. Cornell (1987). *Response Surfaces*, New York: Marcel Dekker Inc.
- Méndez, I. (1977). *Metodología de Superficie de Respuesta*, Comunicaciones Técnicas, I.I.M.A.S., U.N.A.M.
- Myers, R.H. (1971). *Response Surface Methodology*, Boston: Allyn and Bacon Inc.

CAPITULO III ASCENSO POR PENDIENTE MAXIMA

INTRODUCCION.-

Antes de aplicar Análisis Canónico se utiliza la experiencia del investigador para determinar una región de experimentación adecuada y posteriormente ajustar un modelo de segundo orden .

Al hacer Análisis Canónico es importante verificar si el óptimo se encuentra o no dentro de la región de experimentación escogida. En caso que el punto esté fuera, se debe analizar el tipo de cordillera para determinar una mejor zona. Bajo estas circunstancias se aplica nuevamente el procedimiento completo de ajuste y análisis de alguna superficie de segundo orden. Como se puede observar se ha planteado una metodología, para localizar el óptimo que puede ser utilizada secuencialmente.

Otro caso en el que se necesita localizar una mejor región de experimentación es cuando el ajuste indica que el punto crítico corresponde a un punto silla.

Debido a que, en general, en el Análisis Canónico se utilizan diseños que representan altos costos y no pocas dificultades técnicas, resulta poco práctico que el experimentador lo utilice secuencialmente.

De esta manera, se requiere desarrollar una técnica que minimice costos y que sea útil para ubicar alguna región donde posiblemente se encuentre el óptimo y sólo entonces el Análisis Canónico será aplicado. Un procedimiento con estas características es el Método de Ascenso por Pendiente Máxima. (A.P.M.).

III.1- EL ASCENSO POR PENDIENTE MAXIMA

Supongase que se desea maximizar una función Y que depende de k variables independientes, $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$, pero que se desconoce la forma analítica de la relación entre las variables independientes y la variable dependiente.

El primer paso para optimizar una superficie es proponer alguna región inicial de experimentación. Esta servirá como base para encontrar otra u otras que sean mejores, en el sentido de que contengan al óptimo.

Ya que también se busca disminuir los costos y los cálculos relacionados a los estimadores de los parámetros, se propone iniciar con un diseño 2^k o bien un diseño factorial fraccionado. (Myers (1971)) Como no se tiene la seguridad de que la región de experimentación inicial determinada por un diseño de este tipo contenga al óptimo, es conveniente pensar que la superficie es monótona sobre esta región, por lo que se recomienda que el ajuste se haga utilizando como media una función lineal, es decir, una función de la forma

$$\beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i,$$

donde x_i es la variable codificada correspondiente a ξ_i .

En un diseño 2^k , las variables codificadas únicamente toman uno de los dos posibles valores -1 ó 1 siendo el centro del experimento el punto $(0, \dots, 0)$, es decir, la codificación se hace de manera que la media de cada x_i sea igual a cero.

Como ejemplo, para dos variables a dos niveles cada una, se tiene lo siguiente.

TABLA III.1.1

ξ_1	10	20
ξ_2	2	4

Si ξ_1, ξ_2 toman los valores de la tabla III.1.1, la codificación debe hacerse como sigue:

$$x_1 = \frac{\xi_1 - \left(\frac{10+20}{2}\right)}{\frac{20-10}{2}} = \frac{\xi_1 - 15}{5}$$

$$x_2 = \frac{\xi_2 - \left(\frac{2 \cdot 4}{2}\right)}{\frac{4-2}{2}} = \frac{\xi_2 - 3}{1}$$

Notar que x_1 toma los valores -1 y 1 cuando ξ_1 vale 10 y 20 , respectivamente. Además el promedio de los valores de x_1 vale cero. Lo análogo resulta con la variable x_2 .

El codificar las variables simplificará los cálculos algebraicos realizados al emplear el método de los mínimos cuadrados, que es el medio por el cual se hará el ajuste del modelo.

Sea

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i \quad (\text{III.1.1}).$$

el modelo ajustado, con b_0, \dots, b_k los estimadores de mínimos cuadrados de los parámetros β_1, \dots, β_k .

Para poder analizar a \hat{Y} , se avanzarán R unidades, a partir del origen, en la dirección que muestre el máximo ascenso. Una ventaja de trabajar con variables codificadas radica en que el incremento de R unidades en la dirección deseada se puede expresar como $\sum_{i=1}^k x_i^2 = R^2$.

Entonces, el problema es maximizar (para el método de descenso por pendiente máxima, se debe minimizar) la función

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i$$

sujeta a la restricción

$$\sum_{i=1}^k x_i^2 = R^2.$$

Si esto se resuelve para diferentes valores de R , los vectores (x_1, x_2, \dots, x_k) obtenidos determinan una ruta de ascenso máximo.

La restricción se establece por dos razones:

-Maximizar \hat{Y} sin ninguna condición adicional no produce soluciones satisfactorias. (Cuando el modelo es un plano horizontal todos los vectores \underline{x} son

óptimos, cuando el plano tiene cierta inclinación \hat{Y} es no acotada.)

-Maximizar \hat{Y} restringiendo a la región del diseño puede resultar analíticamente muy complicado.

-El valor de R es variable de tal manera que se puedan considerar todos los vectores \underline{x} que determinan la región experimental.

Solución al problema utilizando Multiplicadores de Lagrange.

Sea:

$$Q = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i - \mu \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 - R^2 \right)$$

la Lagrangiana asociada.

Derivando parcialmente respecto a las variables x^j se tiene que

$$\partial Q / \partial x_j = b_j - 2\mu x_j.$$

La derivada parcial respecto a μ es

$$\partial Q / \partial \mu = - \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 - R^2 \right).$$

Igualando $\partial Q / \partial x_j$ con cero y despejando x_j resulta

$$x_j = b_j / 2\mu \quad j=1, \dots, k. \quad (\text{III.1.2})$$

Elevando al cuadrado ambos lados de la igualdad y sumando sobre $j=1, \dots, k$ se tiene

$$\sum_{j=1}^k x_j^2 = \sum_{j=1}^k b_j^2 / 4\mu^2.$$

Usando la restricción se llega a

$$R^2 = \sum_{j=1}^k b_j^2 / 4\mu^2$$

y despejando μ resulta que

$$\mu = \frac{\pm \sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}}{2R}.$$

Esta expresión indica que son dos los posibles puntos críticos. Uno corresponde a un máximo y el otro a un mínimo ya que \hat{Y} es continua y la restricción determina un conjunto compacto.

$$\text{Si } \mu = \frac{\sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}}{2R} \text{ entonces,}$$

$$x_j = \frac{R b_j}{\sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}} \quad j=1, \dots, k.$$

Sustituyendo en la función objetivo

$$\hat{Y}_0 = b_0 + R \sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}$$

$$\text{Si } \mu = \frac{-\sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}}{2R} \text{ entonces,}$$

$$x_j = \frac{-R b_j}{\sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}} \quad j=1, \dots, k.$$

Nuevamente evaluando en la función objetivo:

$$\hat{Y}_0 = b_0 - R \sqrt{\sum_{j=1}^k b_j^2}$$

Por tanto, el máximo se alcanzará cuando $\mu > 0$ y el mínimo cuando $\mu < 0$.

En muchos casos el experimentador quiere conocer cual es el máximo aumento en respuesta si se da un incremento Δ_j en alguna variable ξ_j . Este incremento determina un aumento x_j' en la correspondiente variable codificada x_j . Si se sustituye x_j' en la expresión $x_j = b_j/2\mu$, se obtiene un valor para μ . Este valor se puede sustituir en $x_i = b_i/2\mu$ $i=1, \dots, k$, $i \neq j$ dando lugar a aumentos en las variables independientes $x_1', x_2', \dots, x_k', i \neq j$, que con x_j' determinan respuesta máxima sujeto a que los vectores \underline{x} esten en la esfera de radio $R' = \sqrt{\sum_{i=1}^k (x_i')^2}$. Los aumentos x_i' $i=1, \dots, k$ ($i \neq j$)

determinan aumentos Δ_i ($i=1, \dots, k$) en las variables originales.

Se evalúa Y en forma experimental en los puntos $\xi^0, \xi^0 + \Delta, \xi^0 + 2\Delta, \xi^0 + 3\Delta, \dots$, que estén fuera de la región del diseño, donde ξ^0 es el vector cuyas componentes son los correspondientes valores de $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$ cuando $x_1=x_2=\dots=x_k=0$ y Δ el vector de incrementos $\Delta = (\Delta_1, \dots, \Delta_k)$ o "paso" de la ruta. Las evaluaciones terminan hasta notar alguna curvatura en la función, es decir, cuando Y presenta un crecimiento seguido de un decrecimiento. En este momento habría que ubicar una vecindad en las variables ξ' donde se dió la caída de Y para considerar a esta región como candidata para aplicar nuevamente todo el procedimiento hasta aquí descrito.

Este método secuencial se detiene cuando al comparar la máxima respuesta Y obtenida en las dos últimas regiones utilizadas, el cambio en Y es nulo, casi cero, o bien negativo. En ese instante se espera tener la región adecuada para ajustar un modelo de segundo orden y realizar Análisis Canónico.

Toda esta descripción define el método de Ascenso por Pendiente Máxima.

Tradicionalmente, este es el método más utilizado para localizar regiones en las que se encuentre el óptimo de una función bajo estudio. Sin embargo, existen algunas desventajas al aplicar esta herramienta, dentro de las cuales se puntualizan las siguientes:

-El punto óptimo localizado en la región obtenida, no necesariamente es un óptimo global, sino que puede, en algún caso, ser local.

-A.P.M. depende fuertemente de las escalas de medición de las variables. Al respecto se dará un ejemplo.

-En la medida que se procede con el método, se va perdiendo precisión, al grado que es necesario hacer

pruebas de hipótesis para saber si los términos de primer orden siguen dominando.

Ejemplo III.1.1 (Myers (1971))

$\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ son las variables que determinan una cierta respuesta. Los niveles alto (y bajo de cada una están dadas en la siguiente tabla:

TABLA 11.1.2		
ξ_1	10	15
ξ_2	1	2
ξ_3	25	35
ξ_4	75	85

Además se opta por trabajar con 1/2 fracción de un diseño 2^4 factorial.

Las corridas experimentales son las siguientes

(1)	=	62
ab		69
cd		57
ac		64.5
ad		61.8
bc		64.7
bd		62.2
abcd		66.3

La matriz anterior corresponde a la matriz del plan experimental. a,b,c,d están asociados a los niveles altos de x_1, x_2, x_3, x_4 respectivamente. Si no aparece alguna de estas letras indica nivel bajo.

Empleando variables codificadas, se ajusta un modelo de la forma

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j$$

Los estimadores obtenidos por el método de los mínimos cuadrados, para el anterior modelo, son $b_0=63.44, b_1=1.9625, b_2=2.1125, b_3=-0.3125, b_4=-1.612$.

Supóngase que se desea que cada paso en la ruta de ascenso máximo sea equivalente a un cambio de una unidad en la variable ξ_1 .

Se sabe que

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 12.5}{2.5}$$

Si se toma un incremento de uno en ξ_1 , su

correspondiente variable x_1' está dada por la ecuación:

$$x_1' = \frac{(\xi_1 + 1) - 12.5}{2.5} = \frac{\xi_1 - 12.5}{2.5} + .1 = x_1 + \Delta x_1$$

donde $\Delta x_1 = 0.4$.

Es decir, si ξ_1 aumenta en 1, x_1 aumenta en 0.4 unidades.

En general esto prueba que si ξ_1 se incrementa en Δ_1 , x_1 se incrementa en $\frac{\Delta_1}{2.5}$.

Para $\Delta_1 = 1$ sustituyendo Δx_1 por x_1 en $x_1 = b_1/2\mu$ se tiene que, $\mu = \frac{1.9625}{(0.4)(2)} = 2.453$. El hecho de que $\mu > 0$ implica que se está determinando una ruta de ascenso máximo. En este caso $\mu > 0$, porque tanto b_1 como Δ son positivos. El que $\Delta_1 > 0$, no necesariamente implica $\mu > 0$. Es decir Δ_1 positiva no determina que se avance en la ruta de ascenso máximo.

Conociendo μ es fácil encontrar los valores de x_2 , x_3 , x_4 de respuesta máxima. Simplemente se sustituye y se despeja en $x_i = b_i/2\mu$ con $i=2,3,4$.

Antes de presentar un camino de ascenso máximo, considere las siguientes observaciones

El centro del experimento, en las variables decodificadas, es $\xi_1^0 = 12.5$, $\xi_2^0 = 1.5$, $\xi_3^0 = 30$, $\xi_4^0 = 80$, que es el punto de inicio de la ruta. Recuerde que son los valores ξ^a donde las correspondientes x^a se hacen cero.

Como $x_2 = \frac{\xi_2 - 1.5}{.5}$ entonces

$$(.05)x_2 + 1.5 = \xi_2$$

$$(.05)x_2 + \xi_2^0 = \xi_2$$

Haciendo $x_2 = b_2/2\mu$ se tiene que:

$$(.05) \left(\frac{b_2}{2\mu} \right) = \Delta \xi_2$$

Lo anterior dice que si x_2 cambia $\frac{b_2}{2\mu}$, entonces el correspondiente cambio en ξ_2 será $.5 \left(\frac{b_2}{2\mu} \right)$. Análogamente para decodificar x_3 y x_4 hay que multiplicar por 5 (en este caso coincide en ambas variables), que es el correspondiente divisor en la codificación.

En general, ya se vio que un incremento Δ_1 en ξ_1 corresponderá a un incremento de $\frac{\Delta_1}{2.5}$ en x_1 , que puede expresarse como $\Delta_1 c_1$.

Como

$$\mu = \frac{1.9625}{2\Delta_1} (2.5),$$

entonces

$$x_2 = \frac{b_2}{2\mu} = \frac{2\Delta_1 b_2}{2(1.9625)(2.5)}$$

que se puede reescribir como $x_2 = \Delta_1 c_2$. De manera análoga se puede decir que $x_3 = \Delta_1 c_3$ y $x_4 = \Delta_1 c_4$.

Si el incremento para ξ_1 fuese $k\Delta_1$ (esto es, se dá el k -ésimo paso en la ruta) entonces x_1 , x_2 , x_3 , x_4 dependerán de k , de manera que $x_1 = k\Delta_1 c_1$, $x_2 = k\Delta_1 c_2$, $x_3 = k\Delta_1 c_3$ y $x_4 = k\Delta_1 c_4$.

Entonces $\Delta\xi_1 = k\Delta_1$, $\Delta\xi_2 = k\Delta_1 c_2(0.5)$, $\Delta\xi_3 = k\Delta_1 c_3(5)$, $\Delta\xi_4 = k\Delta_1 c_4(5)$, que pueden ser reescritos de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\Delta\xi_1 &= (k-1)\Delta_1 + \Delta_1, \\ \Delta\xi_2 &= (k-1)\Delta_1 c_2(0.5) + \Delta_1 c_2(0.5) \\ \Delta\xi_3 &= (k-1)\Delta_1 c_3(5) + \Delta_1 c_3(5) \\ \Delta\xi_4 &= (k-1)\Delta_1 c_4(5) + \Delta_1 c_4(5).\end{aligned}$$

El camino de ascenso máximo se puede dar de la siguiente manera.

Se parte del centro del experimento

$$(\xi_1^0, \xi_2^0, \xi_3^0, \xi_4^0) = (12.5, 1.5, 30, 80)$$

Después se suma Δ_1 a ξ_1^0 , $\Delta_1 c_2(0.5)$ a ξ_2^0 , $\Delta_1 c_3(5)$ a ξ_3^0 y $\Delta_1 c_4(5)$ a ξ_4^0 .

Se obtendrá un nuevo punto $(\xi_1', \xi_2', \xi_3', \xi_4')$ al cual se le agrega el vector

$$(\Delta_1, \Delta_1 c_2(.5), \Delta_1 c_3(5), \Delta_1 c_4(5))$$

y así sucesivamente.

Hay que evaluar la función objetivo en cada uno de los puntos que se vayan construyendo siempre y cuando esten fuera de la región experimental. Se procede de esta forma hasta que la función, después de haber mostrado un comportamiento creciente, muestre algún decrecimiento.

La tabla III.1.2 muestra un camino de ascenso máximo para el modelo ajustado en el que fueron necesarios 12 puntos, para finalmente localizar una región donde posiblemente está el punto que corresponde

al valor óptimo de la función.

Podría pensarse en realizar un experimento cuyo centro fuera el punto 11 de la tabla pues es entre los elementos 11 y 12 donde se nota una curvatura en la función.

El cambio en la respuesta en el ensayo 11 es de 63.44 (promedio de las observaciones experimentales iniciales) a 81 (valor obtenido en la corrida 11). Se esperaría que en un experimento posterior el incremento no fuese tan grande.

TABLA III.1.2

corrida		ξ_1	ξ_2	ξ_3
	base	12.5	1.5	30
	Δ	1.0	$\frac{b_2}{2\mu} = 0.5 = 0.215$	$\frac{b_3}{2\mu} = 0.5 = -.319$
	base + Δ	13.5	1.715	29.681
	base + 2Δ	14.5	1.930	29.362
	base + 3Δ	15.5	2.145	29.043
9	base + 4Δ	16.5	2.360	28.724
10	base + 6Δ	18.5	2.790	28.086
11	base + 8Δ	20.5	3.220	27.448
12	base + 9Δ	21.5	3.435	27.129

ξ_4	Y
80	
$\frac{b_4}{2\mu} = 5.0 = -1.643$	
78.357	
76.714	
75.071	
73.428	74.0
70.142	77.0
66.856	81.0
65.213	78.7

A continuación se da un ejemplo que ilustrará como es que el método A.P.M. depende fuertemente de la escala de medición de las variables. La manera en que se desarrolla es delineando dos rutas diferentes, una obtenida tras haber trabajado con variables codificadas y la otra con variables decodificadas.

Ejemplo II.1.2 (Myers (1971))

Suponga que la respuesta depende de dos variables independientes ξ_1 y ξ_2 y que se han considerado los siguientes ensayos experimentales.

TABLA III.1.3

Corrida	ξ_1	ξ_2
1	10	60
2	10	80
3	20	60
4	20	80

Codificando las variables:

$$x_1 = \frac{\xi_1 - 15}{5} \quad x_2 = \frac{\xi_2 - 70}{10}$$

El origen del diseño es $x_1=0$ y $x_2=0$, que en las variables decodificadas corresponde a $\xi_1=15$ y a $\xi_2=70$.

Se supone que la ecuación ajustada está dada por

$$\hat{Y} = 1 + 10x_1 + 2x_2$$

y que se utilizó un diseño 2^2 para dicho ajuste.

Si el primer incremento es calculado sobre la base de un cambio de 5 unidades en ξ_1 (que corresponde a una unidad en x_1), entonces la ruta de ascenso está dada en la siguiente tabla:

TABLA III.1.4

	X_1	X_2	ξ_1	ξ_2
base	0	0	15	70
Δ	1	0.2	5	2
base+ Δ	1	0.2	20	72
base+2 Δ	2	0.4	25	74
base+3 Δ	3	0.6	30	76
base+4 Δ	4	0.8	35	78

Si x_1 se incrementa en 1 se tiene que $1 = \frac{10}{2\mu}$ lo cual implica que $\mu=5$. Por tanto $x_2 = \frac{2}{2\mu} = \frac{1}{5} = .2$, en ξ_2 corresponde un aumento de $(.2)(10) = 2$. Esto explica los valores Δ en la tabla.

Usando la ecuación ajustada en terminos de las variables decodificadas, se tiene que:

$$\hat{Y} = 1 + 10 \left[\frac{\xi_1 - 15}{5} \right] + 2 \left[\frac{\xi_2 - 70}{10} \right]$$

$$= -43 + 2\xi_1 + 0.2\xi_2$$

Nuevamente, el método consiste en encontrar las coordenadas ξ_1 , ξ_2 que maximizan la respuesta sobre una esfera con centro en el origen y de radio R. Por lo tanto, se requiere maximizar la respuesta estimada, sujeta a la restricción

$$(\xi_1 - 15)^2 + (\xi_2 - 70)^2 = R^2$$

Otra vez el problema se resuelve por medio de los Multiplicadores de Lagrange. Sacando las derivadas parciales con respecto a ξ_1 y ξ_2 de la langrangiana resulta que:

$$\xi_1 - 15 = 2/2\mu \qquad \xi_2 - 70 = 0.2/2\mu$$

La ruta de ascenso máximo esta dada en la tabla III.1.5. Por supuesto, se esta considerando un incremento de 5 unidades en ξ_1 que da lugar a un incremento de .5 en ξ_2 despues de despejar μ .

TABLA III.1.5

	ξ_1	ξ_2
base	15	70
Δ	5	0.5
base+ Δ	20	70.5
base+2 Δ	25	71.0
base+3 Δ	30	71.5
base+4 Δ	35	72.0

En este momento es natural preguntar qué camino de ascenso máximo resulta mas conveniente.

Alternativamente uno podría quedarse con la ruta que presente el primer decrecimiento. Sin embargo no se debe olvidar que para la otra ruta, aunque se realice un mayor número de ensayos podemos obtener un valor más grande en Y.

Para saber realmente que ruta elegir, se debe pensar en qué tan cerca se está de obtener una región experimental buena, quizá cuando la cercanía sea obvia convenga tomar los menos ensayos posibles, pero cuando se piense que se está lejos, quizá convenga tomar un mayor número de ensayos.

Volviendo al ejemplo, se puede ver que en una ruta el incremento Δ_2 del paso es mayor que en la otra. Tal vez la de incremento más grande obtenga mayores niveles

de Y , pero debido a la longitud del paso, la ruta puede brincarse el óptimo. Podría ser conveniente quedarse con la ruta de incremento mas pequeño que sería la de menor descenso.

Para ninguna ruta de ascenso máximo existe la seguridad de que se presente un decaimiento en Y , de tal manera que se continuaría experimentando indefinidamente.

En estos casos lo que se sugiere hacer fijar un nivel de respuesta que se considerase adecuado. (Es decir, detener la ruta hasta que Y supere cierto valor).

Es importante hacer ver que esto último es una de las fallas principales en el método A.P.M.

Para finalizar la sección, a manera de resumen, se presentan los pasos para aplicar A.P.M.:

1.-El experimentador debe ajustar una superficie de respuesta de primer orden en alguna región restringida de las variables x_1, x_2, \dots, x_k .

2.- La información del paso 1 es utilizada para localizar un camino de ascenso máximo.

3.- Se conduce una serie de experimentos a lo largo del camino hasta que haya un decrecimiento en la respuesta.

4.- Los pasos 1, 2 y 3 se repiten usando la nueva región, lo cual parece ser prometedora como lo indica el paso 2.

5.- Si la curvatura es evidente y el experimentador está convencido de que puede obtener muy poca o ninguna información adicional de este método, un experimento más elaborado se lleva a cabo y completado con Análisis Canónico.

III.2. -ASCENSO POR PENDIENTE MÁXIMA MODIFICADO.-

Ya se sabe que el Método de Ascenso por Pendiente Máxima es un procedimiento secuencial que sirve para determinar una posible mejor región de experimentación.

Con esto se quiere decir que la zona de operación que el procedimiento arroje, debe proporcionar niveles altos en la respuesta y caracterizarse por contener al punto máximo de Y , si éste existe.

Es claro que se pueden determinar familias de regiones con esta cualidad, por ejemplo se puede pensar en la familia de esferas con radio $R \in \mathbb{R}$ y con centro en el punto que corresponde al óptimo; es por ello que se habla de una mejor región y no de la mejor región.

También es posible que la zona experimental obtenida con ascenso por pendiente máxima, no contenga al óptimo de Y aun cuando éste exista. Esto entre otras cosas puede ser debido a la regla de decisión que hasta ahora se ha adoptado para detener el procedimiento secuencial ya que

i) Si $Y_i > Y_{i-1}$, se obtiene el punto $i+1$ de la ruta de máximo ascenso pero

ii) Si $Y_i < Y_{i-1}$, se determina una nueva región de experimentación que contenga (entre otros) a los puntos $i, i-1$.

Aunque parece muy "lógica" esta regla para detener el procedimiento, tiene, entre uno de sus defectos, el no considerar las variaciones en Y debidas al error experimental. De esta manera podría suceder que $Y_i < Y_{i-1}$ sin que en realidad se hubiese pasado cerca de un máximo.

En esta sección, se esbozará una mejor forma de parar el proceso de ascenso por pendiente máxima, que sí considera las fluctuaciones de la respuesta Y debidas al error experimental.

Sea $Y = \eta(x_1, x_2, \dots, x_k) + c$, la respuesta que se desea optimizar, donde $\eta(x_1, x_2, \dots, x_k)$ es una función continua y el error c cumple con los siguientes

supuestos $(c_i \sim N(0, \sigma^2), E(c_i | c_j) = 0 \text{ y } i \neq j)$. Con esto $Y \sim N(\eta, \sigma^2)$.

Suponga nuevamente que las variables x_i 's han sido codificadas y por otro lado que η puede aproximarse localmente por una función de la forma

$$\beta_0 + \sum_{i=1}^n \beta_i x_i.$$

De esta manera \hat{Y} está dada por $\beta_0 + \sum_{i=1}^n b_i x_i$, donde b_i es el estimador de mínimos cuadrados de β_i .

La ruta de ascenso máximo está dada, para diferentes valores de R , por aquellos puntos que maximizan \hat{Y} sujeta a $\sum_{i=1}^n x_i^2 = R^2$.

Ahora bien, se sabe que para un radio dado, el óptimo, llamado x^* , es:

$$x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*) = \left(\frac{b_1}{2\mu}, \frac{b_2}{2\mu}, \dots, \frac{b_k}{2\mu} \right)$$

Donde μ es el multiplicador de Lagrange que debe ser igual a $\frac{\sqrt{\sum b_i^2}}{2R}$, para que x^* sea máximo (y $-\frac{\sqrt{\sum b_i^2}}{2R}$ para que x^* sea mínimo).

Por lo tanto

$$x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_k^*) = \left(\frac{b_1 R}{\sqrt{\sum b_i^2}}, \frac{b_2 R}{\sqrt{\sum b_i^2}}, \dots, \frac{b_k R}{\sqrt{\sum b_i^2}} \right).$$

Entonces la i -ésima componente de x^* , puede ser escrita como

$$x_i^* = \lambda_i t \quad i=1, \dots, k, \text{ donde } \lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k) =$$

$$\left(\frac{b_1 R}{\sqrt{\sum b_i^2}}, \frac{b_2 R}{\sqrt{\sum b_i^2}}, \dots, \frac{b_k R}{\sqrt{\sum b_i^2}} \right)$$

(i.e. λ es el vector normalizado de (b_1, b_2, \dots, b_k))

$$y \quad t = \sqrt{\sum x_i^2} = R.$$

Las expresiones $x_i^* = \lambda_i t, i=1, \dots, k$, se conocen como ecuaciones paramétricas.

Si t_i es la norma del i -ésimo punto en la ruta, se denotará por $Y(t_i)$ a la respuesta obtenida con radio t_i ($t_0 = 0$). Recuerde que la ruta se puede obtener dando

diferentes valores a t_1 o bien dando valores a μ y obteniendo los respectivos valores de t_1 .

Sea t_{n0} el primer valor para el cuál $Y(t_{n0}) > Y(t_{n0}+1)$. Para determinar si ese decremento en la respuesta es real o es causado por el error experimental (las fluctuaciones en la varianza) se debe discriminar entre las hipótesis.

$$H_0^{(1)}: \eta(t) \geq m_0^{(1)}$$

$$H_1^{(1)}: \eta(t) \leq m_1^{(1)}$$

donde

$$t > t_{n0}$$

$$m_0^{(1)} = \eta(t_{n0})$$

$$m_1^{(1)} = m_0^{(1)} + \Delta \quad \text{con } \Delta < 0$$

Se pueden reescribir $H_0^{(1)}$ y $H_1^{(1)}$ como

$$H_0^{(1)}: \eta(t) \geq \eta(t_{n0}) \quad \text{con } t > t_{n0}$$

$$H_1^{(1)}: \eta(t) \leq \eta(t_{n0}) - \delta \quad \delta = -\Delta > 0$$

Haciendo $S_i = Y(t_{n0} + i) - Y(t_{n0})$, $i=1, 2, \dots$

La regla de decisión para llevar a cabo las pruebas será:

Aceptar $H_0^{(1)}$ si $S_1 \geq c$ ($c > 0$) III.2.1

Rechazar $H_0^{(1)}$ si $S_1 \leq a$ ($a < 0$) III.2.2

Observar $S_{i+1}^{(1)}$ si $a < S_1 < c$ III.2.3

Posteriormente se especifica como determinar los valores de a y c .

En resumen, se ha propuesto una prueba de hipótesis secuencial donde la zona de preferencia por aceptación está determinada, por III.2.1, la zona de preferencia por rechazo por III.2.2 y la zona de indiferencia por III.2.3.

Si $H_0^{(1)}$ es aceptada, entonces quiere decir que el decremento en la función Y es debido al error experimental, en este caso se debe seguir avanzando en la ruta (A.P.M.). Pero cuando $H_0^{(1)}$ es rechazada, la ruta debe abandonarse para empezar una nueva.

Cuando se cae en el caso III.2.3 se debe seguir muestreando hasta que se de el caso III.2.1 o bien el

III.2.2.

Si $H_0^{(1)}$ es aceptada, después de seguir avanzando por la ruta (A.P.M.) se puede encontrar un punto t_{n1} con el cual suceda que $Y(t_{n1+1}) < Y(t_{n1})$, nuevamente se tiene que discriminar entre las hipótesis

$$H_0^{(2)}: \eta(t) \geq m_0^{(2)}$$

$$H_1^{(2)}: \eta(t) \leq m_1^{(2)}$$

con $t > t_{n1}$

$$m_0^{(2)} = \eta(t_{n1})$$

$$m_1^{(2)} = m_0^{(2)} + \Delta \quad (\Delta < 0)$$

La regla de decisión será en esta ocasión

Aceptar $H_0^{(2)}$ si $S_1^{(2)} \geq c$ ($c > 0$)

Rechazar $H_0^{(2)}$ si $S_1^{(2)} \leq a$ ($a < 0$)

Observar $S_1^{(2)}$ si $a < S_1^{(2)} < c$

que es análoga a la anterior.

La cuestión que queda abierta es como determinar los valores de a y c .

Myers y Khuri (1979) demuestran que a y c son tales que

$$a = -c = a_0.$$

a_0 cumple que: $\phi(a_0/\sqrt{2} \hat{\sigma}) = 1/2k'$

donde $\hat{\sigma}^2$ es la varianza estimada de σ en el modelo.

ϕ es la función de distribución de una distribución Normal con media $\mu=0$ y varianza $r^2=1$.

La constante k' se determina pensando cuántas observaciones serían necesarias para que se incremente lo suficiente la respuesta si es creciente, esto en vías de reducir el error tipo I (Rechazar H_0 , cuando H_0 es cierta). Se fija con base a la experiencia que del problema tenga el experimentador.

El procedimiento para probar $H_0^{(1)}$ queda como:

Aceptar $H_0^{(1)}$ si $Y(t_{n0+1}) \geq Y(t_{n0}) - a_0$

Rechazar $H_0^{(1)}$ si $Y(t_{n0+1}) \leq Y(t_{n0}) + a_0$

Observar $Y(t_{n0+1})$ si:

$$Y(t_{n0}) + a_0 < Y(t_{n0+1}) < Y(t_{n0}) + a_0$$

Con este nuevo procedimiento el experimento no se detiene debido a fluctuaciones falsas de Y . La

efectividad del método será notablemente mayor comparada con la del procedimiento con detención como se verá en el siguiente ejemplo.

Ejemplo III.2.1 (continuación Ejemplo III.1.1)

Lo primero que se necesita para aplicar el método de Ascenso por Pendiente Máxima Modificado es calcular el valor de a_0 . Se hará con un valor de $k' = 25$.

Con los datos del ejemplo III.1.1 se tiene que

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{n-1} = \frac{1.4838}{7} = .211974$$

y $\hat{\sigma} = .4604035$.

Ahora

$$\phi \left(\frac{a_0}{(2)^{1/2} (.4604035)} \right) = \frac{1}{50} = .02$$

El cuantil .02 de una normal con media cero y varianza uno es -2.06. Así que

$$\frac{a_0}{(2)^{1/2} (.4604035)} = -2.06$$

por tanto

$$a_0 = -1.3412843$$

La prueba queda

Aceptar $H_0^{(1)}$ si $Y(t_{n0+1}) \geq Y(t_{n0}) + 1.3412843$

Rechazar $H_0^{(1)}$ si $Y(t_{n0+1}) \leq Y(t_{n0}) - 1.3412843$

Observar $Y(t_{n0+1+i})$ si

$Y(t_{n0}) - 1.3412843 < Y(t_{n0+1}) < Y(t_{n0}) + 1.3412843$

Considérese que se continuo observando Y sobre mas puntos en la ruta de Ascenso por Pendiente Máxima para el ejemplo III.1.1 y que de la corrida 11 a 21 se obtuvieron los valores en respuesta dados por la tabla III.2.1

TABLA III.2.1

corrida	Y
11	81.0
12	79.7
13	80.1
14	82.4
15	83.3
16	85.1
17	86.3
18	86.9
19	87.3
20	87.5
21	85.3

En el ejemplo III.1.1 se observó un decaimiento en respuesta en el punto 11, por lo que $Y(t_{n0}) = 81.0$ y $Y(t_{n0+1}) = 79.7$.

Aplicando el método modificado

$$Y(t_{n0}) - 1.3412843 = 79.658716$$

$$Y(t_{n0}) + 1.3412843 = 82.3412843$$

y $79.658716 < 79.7 < 82.3412843$. Por tanto, se observa $Y(t_{n0+2}) = 80.1$.

Como $79.658716 < 80.1 < 82.3412843$, se observa $Y(t_{n0+3}) = 82.4$ que lleva a aceptar $H_0^{(1)}$ (porque $82.4 > 82.3412843$) y a seguir observando valores en la ruta de ascenso máximo hasta que se de otra caída en el valor de la respuesta. Se ve que hasta la corrida 20 se presenta esta situación, de donde $Y(t_{n1}) = 87.5$, $Y(t_{n1+1}) = 85.3$.

Ahora se realiza la prueba

Aceptar $H_0^{(2)}$ si $Y(t_{n1+1}) \geq Y(t_{n1}) + 1.3412843$

Rechazar $H_0^{(2)}$ si $Y(t_{n1+1}) \leq Y(t_{n1}) - 1.3412843$

Observar $Y(t_{n1+i+1})$ si

$$Y(t_{n1}) - 1.3412843 < Y(t_{n1+i}) < Y(t_{n1}) + 1.3412843$$

donde $Y(t_{n1}) + 1.3412843 = 88.841284$

$$Y(t_{n1}) - 1.3412843 = 86.158716$$

Como $85.3 < 86.158716$ se rechaza $H_0^{(2)}$ y se debe pensar en construir un nuevo experimento tomando como origen el ensayo 20. Se observa una ganancia en respuesta de 4.3 unidades del método modificado con respecto al método original.

III.3 ESTIMACION OPTIMA DE LA DIRECCION DEL GRADIENTE EN EL METODO DE ASCENSO POR PENDIENTE MAXIMA

Suponga nuevamente que la relación entre la respuesta y las variables independientes es

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_k X_k + c$$

y que el objetivo es buscar la zona de respuesta máxima con el método (A.P.M). Como siempre, se hace siguiendo la dirección del gradiente de la función

$$\hat{Y} = b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 + \dots + b_k X_k$$

donde b_0, b_1, \dots, b_k son estimadores para $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$.

Puesto que el modelo original involucra un error aleatorio el gradiente de la función ajustada puede no estar apuntando en la dirección de máximo ascenso, es decir puede estar desviado del gradiente del modelo verdadero.

El objetivo de este párrafo será entonces definir una medida para la desviación del gradiente. (Esa medida dependerá del número de ensayos utilizados en el diseño experimental.)

Suponga ahora que la dirección del gradiente estimado por el conjunto de datos difiere del verdadero gradiente en un ángulo θ .

Se esperaría que mientras mas ensayos se ejecutaran en el experimento, θ fuese mas pequeño.

Sea S el tamaño del paso dado en el camino de Ascenso por Pendiente Máxima, entonces $S \cos \theta$ es la componente del gradiente estimado en la dirección del verdadero gradiente.

Si $\cos \theta$ fuese cercano a 1, el gradiente estaría bien estimado. Si $\cos \theta$ fuera negativo estaría estableciendo un descenso y no un ascenso máximo, ya que en este caso θ pertenecería al intervalo $[\pi/2, 3\pi/2]$. Si $\cos \theta$ fuera cercano a cero, se tendría una estimación pobre del gradiente.

Con todo esto, se puede pensar que $S \cos \theta$ mide la mejoría en posición del gradiente estimado.

Si se define un ensayo como la unidad de esfuerzo

en la búsqueda de respuesta máxima, entonces $S_{\cos \theta}/t$ mide el mejoramiento por unidad de esfuerzo, cuando se tienen t ensayos.

Se debe buscar t de tal manera que se maximice el valor esperado del mejoramiento por unidad de esfuerzo, o sea que se maximice $E(S_{\cos \theta}/t)$. Esto es equivalente a maximizar $(1/t)E(\cos \theta)$, donde $E(\cos \theta)$ debe pensarse como una función de t . θ se puede ver como aleatorio.

El resultado principal en esta sección es que el máximo se alcanza cuando t es uno mas que el número de variables independientes del modelo. Invertir en un mayor número de ensayos con la idea de mejorar la medida de precisión del gradiente estimado que aquí se propuso, puede no proporcionar beneficio alguno.

Este resultado se puede aplicar sin tener que determinar la magnitud de la variabilidad y es desarrollado bajo la hipótesis de que el diseño arroja estimadores de las componentes del gradiente no correlacionados, normalmente distribuidos y cuya varianza es constante. Se requiere además que la superficie de respuesta esté bien aproximada por un plano en cualquier localidad.

III.3.1 OBTENCION DE $E(\cos \theta)$

A continuación se desarrolla a grosso-modo, la idea empleada para obtener $E(\cos \theta)$. Un tratamiento mas detallado se puede ver en Brooks y Mickey (1961).

Se tiene que

$$Y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + c$$

donde $c \sim N(0, \sigma_c^2)$.

Se pueden construir estimadores b_i de β_i tales que $b_i \sim N(\beta_i, \sigma^2)$ donde σ^2 es función de t .

El ángulo entre el verdadero gradiente β (con componentes β_i) y el gradiente estimado b (con componentes b_i) es θ ($0 \leq \theta \leq \pi/2$), de donde

$$\cos \theta = \frac{\sum_{i=1}^k b_i \beta_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^k b_i^2 \sum_{i=1}^k \beta_i^2}}$$

$E(\cos \theta)$ se determinará de la distribución conjunta

de la magnitud y el ángulo del error θ del vector aleatorio b .

El conjunto que determina el rango de los valores de las variables independientes se puede rotar para que, sin pérdida de generalidad, β se exprese en unidades de σ como $(\rho, 0, 0, \dots, 0)$.

Bajo este mismo cambio las componentes de b son z_1, z_2, \dots, z_k , donde z_1 se distribuye normalmente con

$$E(z_1) = \begin{cases} \rho & i=1 \\ 0 & \text{en otro caso} \end{cases}$$

$$\text{var}(z_1) = 1 \quad i=1, \dots, n.$$

Sea r la magnitud de b medido en unidades de σ , es decir

$$r = \sqrt{\sum_{i=1}^k z_i^2}.$$

Se tiene entonces que

$$E(\cos\theta) = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{r=0}^{\infty} \cos\theta \cdot f(r, \theta) \, dr \, d\theta$$

con $f(r, \theta)$ dada por

$$f(r, \theta) = \frac{r^{k-1} \cdot (\sin\theta)^{k-2} e^{-1/2(r^2 - 2r\rho\cos\theta + \rho^2)}}{\Gamma(1/2) \Gamma(\frac{k-1}{2}) 2^{k-2/2}}$$

donde Γ es la función analítica Gamma.

Esta densidad se obtiene de la densidad conjunta de z_1, z_2, \dots, z_k la cual se expresa como

$$f(z_1, z_2, \dots, z_k) = (2\pi)^{-k/2} e^{-1/2((z_1 - \rho)^2 + z_2^2 + \dots + z_k^2)}$$

Desarrollando las integrales que definen $E(\cos\theta)$ y expresando $e^{r\rho\cos\theta}$ en su serie de Taylor se concluye que

$$E(\cos\theta) = \frac{\rho}{\sqrt{2}} e^{-\rho^2/2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2}) \cdot (1) \cdot (\frac{\rho^2}{2})^i}{\Gamma(\frac{k-1}{2}) \cdot i! (i!)}$$

Esta expresión resulta muy difícil de evaluar en la gran mayoría de los casos por lo que una buena aproximación a $E(\cos\theta)$ es la siguiente:

$$E\left(\sum_{i=1}^k b_i \beta_i\right) = \sum_{i=1}^k \beta_i E(b_i) = \sum_{i=1}^k \beta_i^2$$

y como la norma de β , en unidades de σ , es ρ , entonces:

$$\sum_{i=1}^k \beta_i^2 = \rho^2 \sigma^2$$

luego,

$$E\left(\sum_{i=1}^k b_i^2\right) = E(b_i^2) + \sum_{i=1}^k E(b_i^2) = (1+\rho^2)\sigma^2 + (k-1)\sigma^2 = (\rho^2+n)\sigma^2$$

Por lo que

$$E(\cos\theta) = \frac{\rho}{\sqrt{n^2 + \rho^2}}$$

Como las β_i 's están estimadas ordinariamente a través de funciones lineales de las observaciones, entonces σ^2 debería ser un múltiplo de σ_c^2 .

Si un conjunto de ensayos se aplicara m veces, σ^2 sería el mismo múltiplo de σ_c^2/m que a su vez debería ser proporcional a σ_c^2/t . Bajo estas circunstancias σ^2 sería proporcional a $1/t$.

Como ρ^2 está en unidades de σ^2 , entonces ρ^2 es proporcional a t .

Sean T , M , $h_k(T)$ definidas de la siguiente forma

$$T = Mt = \rho^2/2$$

$$(1/t)E(\cos\theta) = h_k(T) = Me^{-T} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2} \cdot i) T^{i-1/2}}{\Gamma(\frac{k+2}{2} \cdot i) (i!)}$$

Diferenciando respecto a T

$$\begin{aligned} \frac{dh_k(T)}{dT} &= -\frac{1}{2T} h_k(T) - h_k(T) + h_{k+2}(T) \\ &= -\frac{1}{2T} h_k(T) - Me^{-T} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2} \cdot i) T^{i-1/2}}{(k+2+2i) \Gamma(\frac{k+2}{2} \cdot i) (i!)} \end{aligned}$$

Esta derivada es negativa para todo k y cualesquiera positivos T , t , ρ^2 ; por lo tanto la

función $(1/t)E(\cos\theta)$ es decreciente.

Como el número mínimo de ensayos requeridos para estimar al gradiente, a través de estimadores con componentes no-correlacionadas, debe ser igual al número de factores en el modelo mas uno, entonces $T=K+1$ es el número óptimo de ensayos por conjunto.

La importancia de este resultado radica en que no depende de ningún diseño específico, ni de la variabilidad que esté presente.

Con esto se antoja a investigar mas sobre diseños con $k+1$ puntos (como es el caso de los diseños simplex, Khuri y Cornell (1987), Mendez(1977) y Myers (1971)) y ver más a fondo sus propiedades.

Este resultado en ningún momento dice que en un problema específico donde se tenga un muy buen diseño con mas de $k+1$ puntos, éste no se utilice.

Lo que aquí se presenta va más enfocado a las etapas iniciales de experimentación en donde se buscan propuestas de diseño.

Finalmente, cuando se escoge un diseño con $k+1$ puntos y al momento de experimentar se cumplen las hipótesis que aquí se presentaron el gradiente se ha estimado en forma óptima y la ruta de ascenso construida con el gradiente estimado es efectivamente una ruta de mayor crecimiento en la función.

BIBLIOGRAFIA DEL CAPITULO

- Box, G.E.P., W.G. Hunter y J.S. Hunter (1978). *Statistics for Experimenters*. New York: John Wiley.
- Brooks, S.H. y M.R. Mickey (1961). Optimum Estimation of Gradient Direction in Steepest Ascent Experiments, *Biometrics*, 17, 49-56.
- Cochran, W.M. y G.M. Cox (1957). *Diseños Experimentales*, 2nda. Ed., Trillas.
- Hicks, C.R. (1982). *Fundamental Concepts of Design of Experiments*, 3era. Ed., New York: Holt, Rinehart and Winston.
- Khuri, A.I. y J.A. Cornell (1987). *Response Surfaces*, New York: Marcel Dekker Inc.
- Méndez, I. (1977). *Metodología de Superficie de Respuesta*, Comunicaciones Técnicas, I.I.M.A.S., U.N.A.M.
- Myers, R.H. (1971). *Response Surface Methodology*, Boston: Allyn and Bacon Inc.
- Myers, R.H. y A.I. Khuri (1979). A New Procedure for Steepest Ascent, *Commun. Statist. Theor. Meth.*, A8 (14), 1359-1376, New York: Marcel Dekker Inc.

CAPITULO I V ANALISIS DE CORDILLERAS

INTRODUCCION.-

En los capítulos precedentes se han estudiado tres procedimientos que forman parte de la metodología empleada para optimizar superficies de respuesta. Unos son complementarios de otros.

Se observa que los Multiplicadores de Lagrange son herramienta necesaria para desarrollar el Método de Ascenso por Pendiente Máxima y que este último debe aplicarse antes que el Análisis Canónico para así obtener mejores resultados.

En el caso de Análisis de Cordilleras también se hará uso de los Multiplicadores de Lagrange.

El Análisis de Cordilleras es similar al Ascenso por Pendiente Máxima ya que también se busca maximizar la respuesta ajustada restringida a esferas de radio variante. Sin embargo, el Análisis de Cordilleras por lo general se aplica post- Análisis Canónico y la función objetivo es de segundo orden. Mientras que Ascenso por Pendiente Máxima es pre-Análisis Canónico y la función a optimizar es lineal.

El Análisis de Cordilleras se utilizará cuando el Análisis Canónico muestre que la superficie de respuesta ajustada tiene una cordillera ascendente o descendente, o bien que la superficie sea una silla de montar.

Es decir este método permite localizar óptimos que con Análisis Canónico no se puedan determinar, aunque también puede ser aplicado directamente.

IV.1 EL ANALISIS DE CORDILLERAS.-

Supóngase que después de aplicar el Análisis Canónico se localizó un punto crítico que resultó estar alejado de la zona de experimentación o bien resultó ser un punto silla. El problema sigue siendo optimizar \hat{Y} (superficie de respuesta ajustada) sobre toda la región de experimentación.

Para poder comprender mejor el sistema, la idea del Análisis de Cordilleras es ir optimizando la función alejándose poco a poco del origen y obteniendo puntos con respuesta óptima. Esto se puede lograr si se maximiza \hat{Y} , restringiéndola a esferas de radio R, en donde R toma valores cada vez más grandes.

Entonces, se desea maximizar la respuesta

$$\hat{Y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j \quad (\text{IV.1.1})$$

sujeta a

$$\sum_{i=1}^k x_i^2 = R^2$$

Aunque después de aplicar el Análisis Canónico la función \hat{Y} tiene la forma

$$\hat{Y} = \hat{Y}_0 + \sum_{i=1}^k \lambda_i w_i^2$$

con ésta no se puede obtener mas información, por lo que aquí se trabajará con la expresión IV.1.1.

Para resolver el problema se utilizarán Multiplicadores de Lagrange y el teorema I.2.2 visto en el capítulo I.

Se tiene que maximizar

$$\hat{Y} = f(x_1, x_2, \dots, x_k) = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j$$

sujeto a

$$g(x_1, x_2, \dots, x_k) = \sum_{i=1}^k x_i^2 - R^2$$

Sea F la lagrangiana, con

$$F = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j - \lambda \left[\sum_{i=1}^k x_i^2 - R^2 \right]$$

Usando notación matricial, F se expresa de la siguiente manera

$$F = b_0 + X^T B X + X^T b - \lambda (X^T X - R^2)$$

luego

$$\frac{\partial F}{\partial X} = 2BX + b - 2\lambda X$$

que de manera explícita es

$$\begin{bmatrix} \partial F/\partial x_1 \\ \partial F/\partial x_2 \\ \vdots \\ \partial F/\partial x_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix} + 2 \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & \dots & b_{1k}/2 \\ & b_{22} & & \\ \text{sim} & & & \\ & & & b_{kk} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} - 2\lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \end{bmatrix} \quad (\text{IV.1.2})$$

además

$$\begin{bmatrix} \partial^2 F/\partial x_1^2 \\ \partial^2 F/\partial x_2^2 \\ \vdots \\ \partial^2 F/\partial x_k^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2b_{11} & -2\lambda \\ 2b_{22} & -2\lambda \\ \vdots & \vdots \\ 2b_{kk} & -2\lambda \end{bmatrix}$$

es claro que $\frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j} = b_{ij}$ ($i \neq j$)

de donde

$M(\underline{x}) = 2(B - \lambda I)$ ($M(\underline{x})$ es la matriz hessiana) o bien $M(\underline{x}) = 2(B - \lambda I)$.

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12}/2 & \dots & b_{1k}/2 \\ & b_{22} & & \\ \text{sim} & & & \\ & & & b_{kk} \end{bmatrix}$$

y los puntos estacionarios son aquellos que satisfacen simultáneamente las ecuaciones

$$(B - \lambda I)\underline{x} = -\frac{1}{2}\underline{b} \quad \text{con } \underline{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}$$

$$\sum_{i=1}^k x_i^2 - R^2 = 0$$

Los puntos estacionarios son más fáciles de determinar si se resuelve el sistema $(B - \lambda I)\underline{x} = -\frac{1}{2}\underline{b}$ asignándole valores a λ . Posteriormente se calcula \underline{x} y finalmente se obtiene R . Esto da lugar al siguiente algoritmo.

ALGORITMO PARA EL CALCULO DE PUNTOS ESTACIONARIOS. -

1).- Considérese R como variable y sea λ un valor fijo.

2).- Sustitúyase el valor de λ en la expresión $(B - \lambda I)\underline{x} = -\frac{1}{2}\underline{b}$. Así se obtendrá un punto estacionario \underline{x}^0 .

3).- Calcúlese $R = \sqrt{\underline{x}^0 \underline{x}^0} = \sqrt{\sum_{i=1}^k x_i^2}$
(para saber a qué radio corresponde la restricción.)

4).- Evalúese \hat{Y} con IV.1.1

Nótese que el punto que se obtiene depende del valor que tome λ . Puede ocurrir que el punto estacionario sea un óptimo global o local de la función \hat{Y} o bien, que sea un punto silla según el valor de λ que se haya dado. Por lo que se debe desarrollar un criterio que permita caracterizar a los puntos obtenidos con el algoritmo.

Considérese nuevamente la matriz B.

Sean $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ sus k valores propios (estos son reales puesto que B es simétrica de entradas reales) y suponga que $\mu_{i+1} \geq \mu_i$ con $i=1, \dots, k-1$.

Sean λ_0, λ_1 tales que

$$\lambda_0 \leq \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_k \leq \lambda_1.$$

Si x_0 satisface que $(B - \lambda_0 I)x_0 = -\frac{1}{2}b$ y x_1 satisface $(B - \lambda_1 I)x_1 = -\frac{1}{2}b$, entonces x_0 es un mínimo global de \hat{Y} , x_1 es un máximo global de \hat{Y} restringido a los radios $R_0 = x_0 x_0^t$ y $R_1 = x_1 x_1^t$, respectivamente.

Este resultado se deduce de los cuatro siguientes:

Resultado IV.1.1.- Si $R_1 = R_2$, $\lambda_1 > \lambda_2$ entonces $\hat{Y}_1 > \hat{Y}_2$.

Resultado IV.1.2.- Si $R_1 = R_2$, $M(x_1)$ es definida positiva y $M(x_2)$ es indefinida entonces $\hat{Y}_1 < \hat{Y}_2$.

Una matriz M de $k \times k$ indefinida es aquella para la que existe al menos un vector $z_0 \in R^k$, tal que $z_0^t M z_0 > 0$ y un vector z_1 tal que $z_1^t M z_1 < 0$.

Resultado IV.1.3.- Si $\lambda_v > \mu_1 \quad \forall \quad i=1, \dots, k$, entonces x_v alcanza un máximo local en \hat{Y} . (El planteamiento análogo se puede hacer para el caso de mínimo local.)

Resultado IV.1.4.- Supongáse que en la medida que R se incrementa, se traza un lugar geométrico de puntos estacionarios del mismo tipo (máximos, mínimos ó puntos silla), entonces pasa alguna de las siguientes cosas (considerando a \hat{Y} función de R):

- \hat{Y} decrece monótonamente.
- \hat{Y} crece monótonamente.
- \hat{Y} llega a un máximo y posteriormente decrece monótonamente.

d) \hat{Y} llega a un mínimo y posteriormente crece monótonamente.

Si (c) y (d) ocurren es porque el lugar geométrico ha pasado a través del centro o punto estacionario del sistema cuadrático.

Demostración de los cuatro resultados.

Resultado IV.1.1.-

Se sabe que:

$$(B - \lambda_1 I) \underline{x}_1 = -\frac{1}{2} b \quad (1)$$

$$(B - \lambda_2 I) \underline{x}_2 = -\frac{1}{2} b \quad (2)$$

$$\underline{x}_1^t \underline{x}_1 = \underline{x}_2^t \underline{x}_2 = R^2$$

$$\hat{Y}_1 = \underline{x}_1^t B \underline{x}_1 + \underline{x}_1^t b + b_0 \quad (3)$$

$$\hat{Y}_2 = \underline{x}_2^t B \underline{x}_2 + \underline{x}_2^t b + b_0 \quad (4)$$

Multiplicando (1) y (2) por \underline{x}_1^t y \underline{x}_2^t respectivamente y restando se obtiene

$$\underline{x}_1^t B \underline{x}_1 - \underline{x}_2^t B \underline{x}_2 + \frac{1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b = (\lambda_1 - \lambda_2) R^2$$

Sustrayendo (4) de (3)

$$\begin{aligned} \hat{Y}_1 - \hat{Y}_2 &= \underline{x}_1^t B \underline{x}_1 - \underline{x}_2^t B \underline{x}_2 + (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b \\ &= \underline{x}_1^t B \underline{x}_1 - \underline{x}_2^t B \underline{x}_2 + \frac{1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b + \frac{1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b \\ &= (\lambda_1 - \lambda_2) R^2 + \frac{1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b \end{aligned} \quad (5)$$

Ahora se multiplica (1) por \underline{x}_2^t y (2) por \underline{x}_1^t , enseguida se resta y queda

$$(\lambda_2 - \lambda_1) \underline{x}_1^t \underline{x}_2 = \frac{1}{2} (\underline{x}_1 - \underline{x}_2)^t b \quad (6)$$

Para obtener (6) se utilizan las igualdades .

$$\underline{x}_2^t B \underline{x}_1 = \underline{x}_1^t B \underline{x}_2 \text{ y } \underline{x}_2^t \underline{x}_1 = \underline{x}_1^t \underline{x}_2$$

que surgen de que un número real es igual a su transpuesto.

Sustituyendo (6) en (5)

$$\begin{aligned} \hat{Y}_1 - \hat{Y}_2 &= (\lambda_1 - \lambda_2) R^2 - (\lambda_1 - \lambda_2) \underline{x}_1^t \underline{x}_2 \\ &= (\lambda_1 - \lambda_2) (R^2 - \underline{x}_1^t \underline{x}_2) \end{aligned}$$

Pero

$$R^2 - \underline{x}_1^t \underline{x}_2 = |\underline{x}_1| |\underline{x}_2| - (\underline{x}_1^t \underline{x}_2) > 0$$

ya que $\underline{x}_1^t \underline{x}_2 < |\underline{x}_1| |\underline{x}_2|$, por la desigualdad de Cauchy-Schwartz de donde resulta que $\hat{Y}_1 > \hat{Y}_2$.

Resultado IV.1.2.

Puesto que $M(\underline{x}_1)$ es definida positiva para todo \underline{u} vector de $k \times 1$ $\underline{u} \neq 0$, se tiene que

$$\underline{u}^t M(\chi_1) \underline{u} > 0 \quad (1)$$

Puesto que $M(\chi_2)$ es indefinida, existe al menos un vector $\underline{g} \neq 0$ de $k \times 1$ tal que

$$\underline{g}^t M(\chi_2) \underline{g} < 0 \quad (2)$$

Como $M(\chi_1) = (B - \lambda_1 I)$

$\underline{u}^t B \underline{u} - \lambda_1 \underline{u}^t \underline{u} > 0$, que en particular para el vector \underline{g} resulta que

$$\underline{g}^t B \underline{g} - \lambda_1 \underline{g}^t \underline{g} > 0$$

por lo que $\underline{g}^t B \underline{g} - \lambda_2 \underline{g}^t \underline{g} < 0$.

Combinando (1) y (2) se tiene que

$$\lambda_1 \underline{g}^t \underline{g} < \underline{g}^t B \underline{g} < \lambda_2 \underline{g}^t \underline{g}.$$

Se puede cancelar $\underline{g}^t \underline{g}$, puesto que es un número real positivo, entonces $\lambda_1 < \lambda_2$.

Utilizando el resultado IV.1.1 se concluye que $\hat{Y}_1 < \hat{Y}_2$.

Resultado IV.1.3

La idea de este resultado se basa en probar que la matriz $M(\chi_1)$ es una matriz definida positiva (negativa) para que se alcance un mínimo (máximo) local de Y .

Sea \underline{u} vector de $k \times 1$, $\underline{u} \neq 0$. Para $M(\chi_1)$ se tiene que

$$\underline{u}^t M(\chi_1) \underline{u} = \underline{u}^t (B - \lambda_1 I) \underline{u} = \underline{u}^t B \underline{u} - \lambda_1 \underline{u}^t \underline{u}.$$

Considérese $\underline{u}^t B \underline{u}$. Se sabe del Capítulo II que existe una transformación ortogonal $\underline{u}^t = \underline{v}^t T^t$, de tal manera que : $\underline{u}^t B \underline{u} = \underline{v}^t (\text{diag } (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)) \underline{v}$, donde $[\text{diag } (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k)]$ denota una matriz diagonal cuyos elementos son las raíces características de B .

Como T es una matriz ortogonal

$$\lambda_1 \underline{u}^t \underline{u} = \lambda_1 \underline{v}^t T^t T \underline{v} = \lambda_1 \underline{v}^t \underline{v}.$$

Entonces

$$\begin{aligned} \underline{u}^t M(\chi_1) \underline{u} &= \underline{u}^t (B - \lambda_1 I) \underline{u} = \underline{u}^t B \underline{u} - \lambda_1 \underline{u}^t \underline{u} \\ &= \underline{v}^t \text{diag } (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k) \underline{v} - \lambda_1 \underline{v}^t \underline{v} = \end{aligned}$$

$$\underline{v}^t \text{diag } (\mu_1 - \lambda_1, \mu_2 - \lambda_1, \dots, \mu_k - \lambda_1) \underline{v} = \sum_{i=1}^k (\mu_i - \lambda_1) v_i^2.$$

Si $\underline{u} = 0$, entonces $\underline{v} = 0$ (ya que $\underline{u}^t = \underline{v}^t T^t$).

Si $\lambda_1 > \mu_i \quad \forall \quad i=1, \dots, k$, entonces, $\sum_{i=1}^k (\mu_i - \lambda_1) v_i^2$ es menor que cero y por lo tanto $M(\chi_1)$ es definida

negativa. (se alcanza un máximo local de \hat{Y}).

Si $\lambda_1 < \mu_1 \quad \forall \quad i=1, \dots, k$ entonces, $\sum_{i=1}^k (\mu_i - \lambda_i) V_i^2$ es mayor que cero y por lo tanto $M(\underline{x}_1)$ es definida positiva. (se alcanza un mínimo local de \hat{Y} .)

Resultado IV.1.4.-

Para este resultado lo que se hace es encontrar una expresión adecuada para $\frac{\partial \hat{Y}}{\partial R}$ con

$$\hat{Y} = b_0 + \underline{x}' B \underline{x} + \underline{x}' b$$

El vector \underline{x} tiene que cumplir con la ecuación

$$(B - \lambda I) \underline{x} = -\frac{1}{2} b$$

porque pertenece a un lugar geométrico de puntos estacionarios. Multiplicando por \underline{x}' , se obtiene

$$\underline{x}' B \underline{x} = \lambda \underline{x}' \underline{x} - \frac{1}{2} \underline{x}' b$$

Sustituyendo esta última expresión en \hat{Y} , se llega a que

$$\hat{Y} = b_0 + \lambda \underline{x}' \underline{x} - \frac{1}{2} \underline{x}' b + \underline{x}' b = b_0 + \lambda \underline{x}' \underline{x} + \frac{1}{2} \underline{x}' b, \quad (1)$$

en donde \hat{Y} está en función de λ y de \underline{x} .

Cuando λ varía infinitesimalmente, \underline{x} debe variar también en cantidades muy pequeñas (por lo tanto R cambia en proporciones mínimas) y según la última expresión para \hat{Y} , ésta debe modificarse muy poco.

Analíticamente se tiene que

$$\begin{aligned} \hat{Y} + \delta \hat{Y} &= b_0 + (\lambda + \delta \lambda) (\underline{x} + \delta \underline{x})' (\underline{x} + \delta \underline{x}) + \frac{1}{2} (\underline{x} + \delta \underline{x})' b \\ &= b_0 + (\lambda + \delta \lambda) (\underline{x}' + (\delta \underline{x})') (\underline{x} + \delta \underline{x}) + \frac{1}{2} \underline{x}' b + \frac{1}{2} (\delta \underline{x})' b \\ &= b_0 + \lambda \underline{x}' \underline{x} + \lambda (\delta \underline{x})' \underline{x} + (\delta \lambda) \underline{x}' \underline{x} + (\delta \lambda) (\delta \underline{x})' \underline{x} + \lambda \underline{x}' (\delta \underline{x}) + \\ &\quad \lambda (\delta \underline{x})' (\delta \underline{x}) + (\delta \lambda) \underline{x}' (\delta \underline{x}) + (\delta \lambda) (\delta \underline{x})' (\delta \underline{x}) + \frac{1}{2} \underline{x}' b + \frac{1}{2} (\delta \underline{x})' b. \end{aligned} \quad (2)$$

en donde $\delta \lambda$, $\delta \underline{x}$, $\delta \hat{Y}$ denotan incrementos en λ , \underline{x} y \hat{Y} respectivamente.

Sustrayendo la ecuación (1) de (2) se llega a

$$\delta \hat{Y} = 2\lambda \underline{x}' (\delta \underline{x}) + (\delta \lambda) \underline{x}' \underline{x} + \frac{1}{2} (\delta \underline{x})' b + Q_2$$

con

$$Q_2 = (\delta \lambda) (\delta \underline{x})' \underline{x} + \lambda (\delta \underline{x})' (\delta \underline{x}) + (\delta \lambda) \underline{x}' (\delta \underline{x}) + (\delta \lambda) (\delta \underline{x})' (\delta \underline{x}),$$

que denota términos de segundo orden en $\delta \lambda$ y $\delta \underline{x}$.

La ecuación (6) del Resultado IV.1.1 se obtuvo para cualesquiera \underline{x}_1 (con el correspondiente λ_1) y \underline{x}_2

(con el correspondiente λ_2) puntos críticos de F, entonces

$$(\lambda_2 - \lambda_1) x_1' x_2' = \frac{1}{2} (x_1' - x_2')' b$$

Haciendo $\lambda = \lambda + \delta\lambda$, $\lambda_1 = \lambda$, $x_1 = x - \delta x$, $x_2 = x$ y sustituyendo se tiene que

$$\begin{aligned} (\delta\lambda) x' (x + \delta x) &= -\frac{1}{2} (\delta x)' b \\ \Rightarrow \delta\lambda x' x + (\delta\lambda) x' (\delta x) + \frac{1}{2} (\delta x)' b &= 0 \\ \Rightarrow \delta\lambda x' x + \frac{1}{2} (\delta x)' b &= Q_2' \end{aligned}$$

con $Q_2' = -(\delta\lambda) x' (\delta x)$.

$$\therefore \delta \hat{Y} = 2\lambda x' \delta x + Q_2' + Q_2 = 2\lambda x' \delta x + Q_2''$$

con $Q_2'' = Q_2' + Q_2$.

Sin embargo, es de interés encontrar una expresión para δY que sólo dependa de R, por lo que si se considera δx tal que sea paralelo a x resulta que

$$\begin{aligned} x' (\delta x) &= x \cdot (\delta x) = \|x\| \|\delta x\| = R(\delta R) \\ \therefore \delta \hat{Y} &= 2\lambda R(\delta R) + Q_2'' \end{aligned}$$

$$\frac{\delta \hat{Y}}{\delta R} = 2\lambda R + \frac{Q_2''}{\delta R}$$

Haciendo tender a cero todos los incrementos

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial R} = 2\lambda R$$

Considérese ahora el lugar geométrico con puntos estacionarios del mismo tipo (máximos ó mínimos absolutos, máximos ó mínimos locales, o bien puntos silla).

La función $\hat{Y}(R)$ tiene a lo más dos puntos críticos, en $\lambda = 0$ ó $R = 0$.

Si $R = 0$ el lugar geométrico es de mínimos ó máximos absolutos. Ya que el problema de optimizar \hat{Y} sujeto a $\sum_{i=1}^k x_i^2 = 0$, sólo tiene un punto que cumple con la restricción, ese punto es máximo y mínimo.

Cuando $\lambda = 0$ el punto estacionario correspondiente se obtiene resolviendo las ecuaciones

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_i} = 0 \quad \forall i=1, \dots, k$$

que en notación matricial se reescribe como

$$Bx = -\frac{1}{2}b$$

que coincide con el punto estacionario sin restricciones al cual se denota por x_0 .

Considérese un lugar geométrico que pase por el punto estacionario sin restricciones x_0 y sea $R_0 = x_0^t x_0$. Si $R < R_0$, a la función $\hat{Y}(R)$, sólo le queda crecer o decrecer. (Sólo tiene un único punto crítico, en $R = R_0$). Lo mismo ocurre si $R > R_0$. Quizá uno de los puntos críticos a considerar sea $R = 0$, que haría que la derivada se anulara, pero este punto está en el extremo inferior del dominio de $\hat{Y}(R)$.

Cuando el lugar geométrico no pasa por el punto estacionario sin restricciones, λ siempre es diferente de cero y la función $\hat{Y}(R)$, sólo crece o decrece ya que no tiene puntos críticos. (Excepto quizá por $R = 0$).

Por lo tanto (a), (b), (c), (d) del Resultado IV.1.4 se cumplen y por lo que se mencionó en el último párrafo, si (c) y (d) ocurren entonces el lugar geométrico pasa por el centro del sistema.

Una vez que se han demostrado los cuatro resultados, se argumentará por qué los máximos (mínimos) locales del resultado IV.1.3 también son máximos (mínimos) globales.

Se divide el rango de λ (pensada como variable) en $k + 1$ intervalos utilizando los valores característicos de la matriz B, suponiendo que ya están ordenados, es decir $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_k$.

Estos intervalos son de la forma

$$(-\infty, \mu_1), (\mu_1, \mu_2), \dots, (\mu_{k-1}, \mu_k), (\mu_k, \infty).$$

Si λ tiende a μ_1 entonces $\det(B - \lambda I)$ tiende a 0, de donde se desprende que x tiende a $\pm \infty$, de tal manera que R tiende a ∞ .

Si λ tiende a $\pm \infty$ entonces $\det(B - \lambda I)$ tiende a ∞ , por lo que x tiende a 0, de tal manera que R tiende a 0.

Ahora se demostrará que $\frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2}$ es positiva para toda $R \neq 0$ y es cero cuando R tiende a cero. Esto constituye

el resultado IV.1.5, que permitirá elaborar una gráfica donde R será la ordenada y λ la abscisa.

Se sabe que

$$(B - \lambda I)X = -\frac{1}{2} b \quad (1)$$

$$X^t X = R^2 \quad (2)$$

Derivando (1) con respecto a λ se obtiene que

$$\frac{\partial (B - \lambda I)X}{\partial \lambda} = \frac{\partial (-\frac{1}{2} b)}{\partial \lambda} = 0$$

Por la regla de la derivada de un producto ocurre que

$$\begin{aligned} \frac{\partial (B - \lambda I)X}{\partial \lambda} &= -X + (B - \lambda I) \frac{\partial X}{\partial \lambda} \\ &\rightarrow (B - \lambda I) \frac{\partial X}{\partial \lambda} = X \end{aligned} \quad (3)$$

Haciendo lo mismo con (2) se llega a

$$X^t \frac{\partial X}{\partial \lambda} + \frac{\partial X^t}{\partial \lambda} X = 2R \frac{\partial R}{\partial \lambda}$$

Como $X^t \frac{\partial X}{\partial \lambda} = \frac{\partial X^t}{\partial \lambda} X$, se tiene que

$$2 X^t \frac{\partial X}{\partial \lambda} = 2R \frac{\partial R}{\partial \lambda} \quad \text{•} \quad X^t \frac{\partial X}{\partial \lambda} = R \frac{\partial R}{\partial \lambda} \quad (4)$$

Tomando la segunda derivada de (1) respecto a λ , da:

$$\begin{aligned} -\frac{\partial X}{\partial \lambda} + (B - \lambda I) \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} &= \frac{\partial X}{\partial \lambda} \\ \text{•} (B - \lambda I) \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} &= 2 \frac{\partial X}{\partial \lambda} \end{aligned} \quad (5)$$

Diferenciando por segunda vez (2) queda

$$X^t \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} + \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right) = R \frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2} + \left(\frac{\partial R}{\partial \lambda} \right)^2 \quad (6)$$

Si se multiplica (3) y (5) por $\left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t$ y

$\left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t$ respectivamente (3) queda

$$\left(\frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} \right)^t (B - \lambda I) \frac{\partial X}{\partial \lambda} = \left(\frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} \right)^t X \quad \text{•} \quad \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t (B - \lambda I) \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} = X^t \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2}$$

y (5) queda

$$\left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t (B - \lambda I) \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} = 2 \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)$$

Si se restan estas dos expresiones se tiene que

$$X^t \frac{\partial^2 X}{\partial \lambda^2} - 2 \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial X}{\partial \lambda} \right) = 0 \quad (7)$$

La ecuación (6) se puede reexpresar como

$$x^t \frac{\partial^2 x}{\partial \lambda^2} - 2 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) + 3 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) = R \frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2} + \left(\frac{\partial R}{\partial \lambda} \right)^2$$

y sustituyendo (7) en esta nueva forma de (6) resulta que:

$$R \frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2} = 3 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) - \left(\frac{\partial R}{\partial \lambda} \right)^2 \quad (8)$$

Ahora

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \lambda} &= \frac{\partial (x^t x)^{1/2}}{\partial \lambda} = \frac{1}{2} (x^t x)^{-1/2} \left(\left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t x + x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) = \\ &= \frac{1}{2} (x^t x)^{-1/2} \left(2x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) = x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} / (x^t x)^{1/2} \end{aligned} \quad (9)$$

Multiplicando (8) por R^2 se obtiene

$$R^3 \frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2} = 3R^2 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) - R^2 \left(\frac{\partial R}{\partial \lambda} \right)^2 \quad (10)$$

Sustituyendo (9) en (10)

$$\begin{aligned} R^3 \frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2} &= 2R^2 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) + R^2 \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) - \left(x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^2 \right] \\ &= 2R^2 \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) + x^t x \left[\left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right) - \left(x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

En (11) se puede ver que del lado derecho, el primer término es no negativo y sólo se hace cero si $R=0$ o bien $\frac{\partial x}{\partial \lambda} = 0$.

El segundo término de (11) es no negativo ya que

$$x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \leq \|x\| \left\| \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right\|$$

por la desigualdad de Cauchy-Schwartz. (Ver Friedberg, Insel y Spence (1982)).

Entonces

$$\left(x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^2 \leq \|x\|^2 \left\| \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right\|^2.$$

Esta última expresión se puede reescribir como

$$\left(x^t \frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^2 \leq x^t x \left(\frac{\partial x}{\partial \lambda} \right)^t \frac{\partial x}{\partial \lambda}$$

que es como aparece en (11).

Ese término sólo se hace cero si $x=0$, es decir $R=0$ o bien que $\frac{\partial x}{\partial \lambda} = 0$. (El paralelismo entre x y $\frac{\partial x}{\partial \lambda}$ no se da porque $\frac{\partial x}{\partial \lambda}$ es un vector tangente a la curva en $x(\lambda)$).

Si $\frac{\partial x}{\partial \lambda} = 0$, la ecuación (3) dice que $x=0$ y entonces $R=0$.

Del resultado IV.1.5 y del párrafo inmediato anterior al mismo, se puede concluir que, $\frac{\partial^2 R}{\partial \lambda^2}$, es positiva excepto cuando $R = 0$.

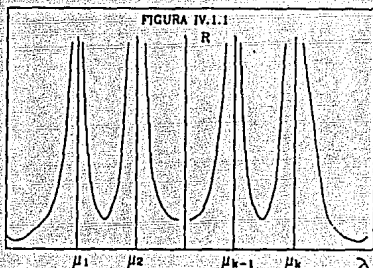
Si $\frac{\partial R}{\partial \lambda} = 0$ esto no implica que $\frac{\partial X}{\partial \lambda} = 0$ ya que si el producto escalar de dos vectores es cero no necesariamente alguno de ellos tiene que ser el vector cero. (Ver ecuación (4))

La gráfica de R (tomada como ordenada) contra λ como abscisa se comporta de la siguiente manera.

Si λ tiende a $-\infty$, $R = 0$ y R se incrementa monótonamente con concavidad hacia arriba, tendiendo a infinito cuando λ tiende a μ_1 (El menor valor característico).

Entre dos raíces características, R viene de infinito en μ_1 , pasa a través de un punto estacionario (será un punto mínimo local por la concavidad) y otra vez se encamina a infinito cuando se acerca a μ_{i+1} .

Finalmente para λ mayor a μ_k pero muy cercano a ella, R toma valores en infinito y en la medida que λ crece R tiende a 0 (Ver Figura IV.1.1).



Cada valor de R proporciona a lo más $2k$ correspondientes valores de λ , es decir $2k$ puntos estacionarios, ya que en los intervalos $(-\infty, \mu_1)$, (μ_k, ∞) habría una λ y en (μ_i, μ_{i+1}) podría haber dos. En total quedarían $2 + 2(k-1) = 2k$.

El número de λ 's y por lo tanto de x 's

estacionarias que corresponde a un R será menor si algunas de las curvas en la figura IV.1.1 tienen su mínimo por arriba del valor de R considerado.

Numérense estas λ' s como $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_H$ donde $H \leq 2k$ supóngase que ya están ordenadas de mayor a menor y que se desea el máximo global de \hat{Y} sujeto a $\sum_{i=1}^k x_i^2 = R^2$ (R fija).

Los únicos puntos estacionarios en esta esfera son generados por $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_H$ al sustituirlos en $(B - \lambda I)x = -\frac{1}{2}b$. Dichos puntos estacionarios son denotados por x_1, x_2, \dots, x_H .

El problema de maximización aquí siempre tiene solución ya que \hat{Y} es continua y la restricción determina un conjunto compacto. Ahora, el teorema de Lagrange en el caso de una sola restricción en forma de ecuación dice que el máximo se alcanzará en x_i , para alguna $i=1, \dots, H$.

Por el resultado IV.1.1, $\hat{Y}(x_H) > \hat{Y}(x_i)$ $\forall i=1, \dots, H-1$ ya que $\lambda_H > \lambda_i \forall i=1, \dots, H-1$.

Entonces, dentro de los puntos estacionarios, x_H es el de respuesta máxima y como entre ellos debe estar el punto máximo, \hat{Y} alcanza un máximo absoluto restringiéndose a un esfera de radio R en x_H .

Puesto que $\lambda_H > \mu_k$, entonces x_H es el máximo local del resultado IV.1.3.

Un razonamiento análogo se puede seguir para concluir que x_1 es un punto donde se alcanza respuesta mínima.

La discusión anterior es la base del siguiente procedimiento.

PROCEDIMIENTO DE BUSQUEDA DE MAXIMOS O MINIMOS ABSOLUTOS.

Se desea conocer el lugar geométrico de los máximos (mínimos) absolutos de \hat{Y} cuando R se incrementa. Se debe entonces:

- 1).- Conocer todos los valores propios de la matriz B . (Se supone que ellos son $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_k$ y

además que $\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_k$.)

2).- Sustituir en la expresión $(B - \lambda I)x = -\frac{1}{2}b$ valores de λ tales $\lambda > \mu_k$. Esto garantizará que $M(x)$ sea una matriz definida negativa y por lo tanto el punto estacionario será un máximo absoluto de \hat{Y} sobre la esfera de radio $R(\lambda)$. (Para el caso de mínimos hay que tomar $\lambda < \mu_1$).

3).- Hacer $k + 1$ gráficas en R^2 , donde la abscisa es R , la ordenada para la i -ésima gráfica ($i=1, \dots, k$) es x_i y la ordenada para la gráfica $k+1$ es \hat{Y} .

Con unos cuantos valores de λ será posible determinar aproximadamente el lugar geométrico de los máximos absolutos de \hat{Y} , lugar geométrico que podrá ser utilizado como una ruta de ascenso máximo.

La idea del apartado 3) de este procedimiento es que con unos cuantos puntos y aplicando las conclusiones del resultado IV.1.4 se puedan determinar condiciones de optimalidad para valores de R que sean de interés.

Sí la R que se tomó proporciona puntos fuera de la región de experimentación, la información obtenida es poco confiable.

Sí se escoge λ entre dos valores característicos se puede caer en dos diferentes lugares geométricos dependiendo si se está a la derecha o a la izquierda del valor λ para la cual R es estacionaria. Si se quiere maximizar o minimizar \hat{Y} estos valores de λ no son de interés.

Se concluye esta sección con una breve explicación del objetivo en términos del problema de superficie de respuesta, de los procedimientos aquí expuestos y un ejemplo de los mismos.

El Análisis de Cordilleras es un método que permite transformar un problema de optimización cuya representación gráfica estaría en R^{k+1} a uno en R^2 .

El procedimiento de búsqueda de máximos y mínimos absolutos y las formas que adopta la gráfica \hat{Y} contra R son las principales consecuencias del Análisis de

Cordilleras.

Cabe aclarar que se toma como variable independiente a λ , es decir al multiplicador de Lagrange, lo cuál parece ser contradictorio al tipo de gráficas que se están proponiendo, ya que R depende de λ . Esta elección es sólo por facilidad en los cálculos. Es claro que los puntos óptimos que se obtengan dependen básicamente de la esfera a la que se esté restringiendo la función \hat{Y} . Por esto, R es variable independiente en las gráficas contra \hat{Y} , x_1 , x_2, \dots, x_k .

Se centra la atención en la gráfica que se elabora con \hat{Y} pues no se debe olvidar que la respuesta es la que interesa óptimizar. Gracias al resultado IV.1.4 se sabe que la curva que describe \hat{Y} cuando cambia R será

- a).- Monótona creciente,
- b).- Monótona decreciente,
- c).- pasará por un máximo y luego decrecerá,
- d).- pasará por un mínimo y luego crecerá.

Suponga que esta curva se construyó considerando puntos de respuesta máxima, que aún no se ha realizado Análisis Canónico y que es de interes ver si \hat{Y} tiene máximo o no.

Si se presenta el caso c), \hat{Y} tiene un máximo global. Entonces lo que habría que ver es si el valor de R correspondiente a este máximo global, es tal que el punto x donde \hat{Y} alcanza el máximo, permite que x esté dentro de la zona experimental.

Si cae dentro se tienen las condiciones de respuesta máxima, en caso contrario se presenta una cordillera ascendente.

Si ocurre a) lo más que se puede hacer es fijar un cierto nivel \hat{Y} y buscar las condiciones x_0 que determinen ese nivel (con apoyo de las gráficas x_1 vs. R, $i=1, \dots, k$). Debe tenerse en mente que para el nivel que se fije en \hat{Y} , x_0 debe estar dentro de la zona inicial experimental. Nótese que extrapolar puede

llevar a conclusiones falsas. Algo análogo se haría en el caso d).

Si ocurriese b) se tendría que \hat{Y} tiene un máximo global en $R=0$, es decir en el origen del diseño experimental. Puesto que un punto máximo global satisface la ecuación

$$B\bar{x} = -\frac{1}{2} b$$

entonces $b=0$, es decir, si \bar{x}_0 máximo es igual al vector cero, el estimador por mínimos cuadrados de los términos lineales vale exactamente cero. Esto por supuesto difícilmente ocurre en la práctica e implica que un modelo de segundo orden no es adecuado.

Nótese que la exposición anterior se hizo pensando que no se había realizado Análisis Canónico y que las conclusiones obtenidas sobre el sistema fueron muy similares a las que se obtuvieron con Análisis Canónico.

Sin embargo en la introducción se mencionó que Análisis de Cordilleras por lo general se aplica post Análisis Canónico. Se ilustrará esto cuando la gráfica \hat{Y} vs. R es construida utilizando un lugar geométrico de puntos máximos y que el interés sobre la respuesta es maximizarla. En este caso se recurre al Análisis de Cordilleras cuando el Análisis Canónico ha presentado un punto silla, un punto mínimo o algún tipo de cordillera (ascendente o descendente).

Si ocurriera a) y d) nuevamente se debería seleccionar un nivel adecuado de \hat{Y} (adecuado en el sentido de que produzca valores grandes de \hat{Y}) y se tendría que volver a experimentar considerando en la zona del diseño puntos \bar{x}' que den respuesta estimada alta.

Si ocurriera c) el radio R donde \hat{Y} alcanza un máximo absoluto sería tal que la esfera de radio R contendría a la zona del diseño. En este caso se podría tratar de maximizar \hat{Y} para valores de R sin salirse de la región experimental, buscar las condiciones \bar{x} que dieran este máximo y tomar estas

condiciones como las correspondientes a un nuevo origen experimental.

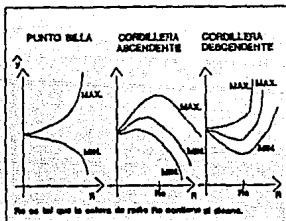
Todo esto se podría replantear diciendo que en vez de maximizar \hat{Y} se desea optimizar \hat{Y} .

Antes de Análisis Canónico se tendría que ir analizando simultáneamente las gráficas del lugar geométrico de máximos restringidos y la del lugar geométrico de mínimos restringidos.

Si por ejemplo, la gráfica de máximos correspondiera al caso c), como sólo hay un punto estacionario sin restricciones, la de mínimos correspondería al caso b) y c), después se tendría que ver si la R que produce a la \hat{Y} máxima permite que el punto óptimo esté dentro de la región experimental.

Si las gráficas se hacen post Análisis Canónico y se obtiene un punto silla o alguna cordillera, las gráficas serían como las de la figura IV.1.2.

FIGURA IV.1.2



Ejemplo IV.1.1

Del ejemplo I.1.4 se tenía que

$$f(x_1, x_2) = 55.84 + 7.31x_1 + 26.65x_2 - 3.03x_1^2 + 6.95x_2^2 + 2.69x_1x_2$$

$$g(x_1, x_2) = 85.72 + 21.85x_1 + 8.52x_2 - 9.2x_1^2 - 5.18x_2^2 - 6.26x_1x_2$$

$f(x_1, x_2)$ y $g(x_1, x_2)$ son superficies ajustadas de segundo orden. Se aplicará a cada una de ellas la técnica planteada en esta sección. Primero se hará con $f(x_1, x_2)$ donde

$$f(x_1, x_2) = b_0 + x_1^t b + x_2^t B x_1$$

con

$$b_0 = 55.84 \quad b = \begin{pmatrix} 7.31 \\ 26.65 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 3.03 & 1.345 \\ 1.345 & -6.96 \end{pmatrix} \quad X = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix}$$

Se tiene que

$$B^{-1} = \begin{pmatrix} -0.361 & -0.0697 \\ -0.0597 & -0.1571 \end{pmatrix}$$

El punto estacionario de f es

$$X^0 = \begin{pmatrix} 2.24290 \\ 2.34910 \end{pmatrix}$$

El cálculo de las raíces características se hace resolviendo la ecuación

$$\text{Det} \begin{pmatrix} -3.03 - \lambda & 1.345 \\ 1.345 & -6.96 - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

equivalente a

$$\lambda^2 + 9.99\lambda + 19.2798 = 0$$

cuyas raíces son

$$\lambda_1 = -2.6138$$

$$\lambda_2 = -7.3762$$

Por los signos de λ_1 y λ_2 , X^0 es un máximo global.

Para conocer puntos con respuesta máxima en esferas de radio R , se resuelve el sistema

$$\begin{pmatrix} -3.03 - \mu & 1.345 \\ 1.345 & -6.96 - \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3.655 \\ -13.325 \end{pmatrix}$$

para valores de μ mayores que λ_1 .

Las soluciones de X_1 y X_2 para cualquier μ son

$$X_1 = \frac{343.3609 + 3.655\mu}{\mu^2 + 9.99\mu + 19.2798}$$

$$X_2 = \frac{45.2906 + 13.325\mu}{\mu^2 + 9.99\mu + 19.2798}$$

Después de obtener x_1 y x_2 se evalúan R y f .

La tabla IV.1.1 muestra valores de x_1 , x_2 y f para μ entre -1 y 20 .

TABLA IV.1.1

X1	X2	μ	R	f
0.1881	0.5036	20.0	0.54	69.02
0.2031	0.5341	18.5	0.57	69.74
0.2207	0.5685	17.0	0.61	70.54
0.2414	0.6077	15.5	0.65	71.45
0.2662	0.6528	14.0	0.70	72.47
0.2964	0.7052	12.5	0.76	73.64
0.3340	0.7669	11.0	0.84	74.98
0.3819	0.8407	9.5	0.92	76.54
0.4449	0.9307	8.0	1.03	78.38
0.5307	1.0430	6.5	1.17	80.58
0.6541	1.1877	5.0	1.36	83.25
0.8445	1.3825	3.5	1.62	86.53
1.1713	1.6630	2.0	2.03	90.56
1.8426	2.1184	0.5	2.81	94.74
2.2490	2.3491	0.0	3.25	95.36
3.8588	3.1065	-1.0	4.95	86.80

$$g(x_1, x_2) = c_0 + x^t c + x^t C x$$

donde

$$c_0 = 85.72 \quad c = \begin{pmatrix} 21.85 \\ 8.59 \end{pmatrix} \quad C = \begin{pmatrix} -9.2 & -3.13 \\ -3.13 & -5.18 \end{pmatrix}$$

$$C^{-1} = \begin{pmatrix} -.1368 & .0826 \\ .0826 & -.243 \end{pmatrix}$$

El punto estacionario de g es

$$X^* = \begin{pmatrix} 1.1397 \\ 0.1404 \end{pmatrix}$$

El determinante de $C - \lambda I$ es igual a

$$\lambda^2 + 14.38\lambda + 37.8591$$

cuyas raices son $\lambda_1 = -.6814$ y $\lambda_2 = -13.6885$.

Puntos de respuesta máxima para una esfera de radio R se encuentran resolviendo el sistema

$$\begin{pmatrix} -9.2 - \mu & -3.13 \\ -3.13 & -5.18 - \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10.925 \\ -4.295 \end{pmatrix}$$

para valores de μ mayores que λ_1 .

Las soluciones del sistema son

$$x_1 = \frac{43.14815 \cdot 10.925\mu}{\mu^2 + 14.38\mu + 37.8591}$$

$$x_2 = \frac{5.3187 \cdot 4.295\mu}{\mu^2 + 14.38\mu + 37.8591}$$

La tabla IV.1.2 muestra la misma información que la tabla IV.1.1 pero para la función g. Los valores de μ están entre -5 y 20.

TABLA IV.1.2

x1	x2	μ	R	g
0.3607	0.1257	20.0	0.38	93.12
0.3796	0.1312	18.5	0.40	93.41
0.4006	0.1371	17.0	0.42	93.73
0.4241	0.1435	15.5	0.45	94.06
0.4506	0.1504	14.0	0.48	94.45
0.4807	0.1578	12.5	0.51	94.85
0.5152	0.1658	11.0	0.54	95.28
0.5551	0.1742	9.5	0.58	95.75
0.6019	0.1829	8.0	0.63	96.25
0.6577	0.1915	6.5	0.68	96.78
0.7255	0.1988	5.0	0.75	97.33
0.8103	0.2026	3.5	0.84	97.88
0.9204	0.1970	2.0	0.94	98.39
1.0731	0.1648	0.5	1.09	98.74
1.1397	0.1405	0.0	1.15	98.77
1.2188	0.1926	-0.5	1.22	98.73

Si se intenta maximizar f y g en forma simultanea se observa que valores de respuesta alta para estas funciones se alcanzan en vectores (x_1, x_2) diferentes.

Nótese que si la respuesta en f crece los valores de x_2 también crecen, pero si g crece los correspondientes valores en x_2 decrecen.

Este ejemplo ilustra las dificultades de optimización para multirespuesta. La solución propuesta en el ejemplo I.1.4 resulta mas conveniente.

Las gráfica f contra R con sus correspondientes gráficas x_1 contra R, x_2 contra R y la gráfica g contra

R con sus correspondientes gráficas x_1 contra R, x_2 contra R, se presentan en las figuras IV.1.3 y IV.1.4 respectivamente.

FIGURA IV.1.3

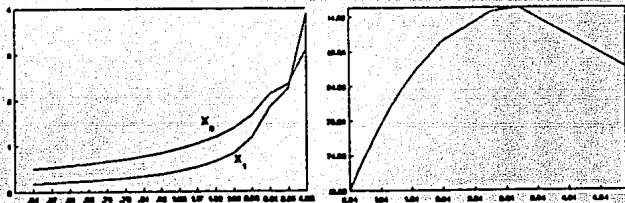
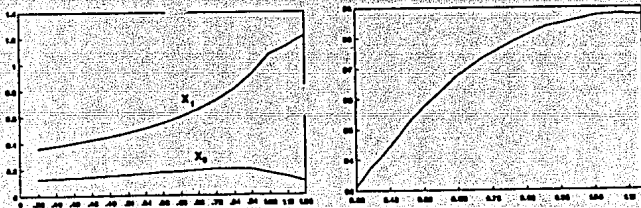


FIGURA IV.1.4



IV.2.-ANÁLISIS DE CORDILLERAS MODIFICADO

El método de Análisis de Cordilleras usual en ningún momento considera las dificultades que puedan ocurrir debido a grandes fluctuaciones en la varianza de la respuesta estimada sobre una esfera de radio dado.

Por ello, en general el método usual puede producir estimaciones muy malas de la respuesta máxima (mínima) y de las condiciones sobre las variables independientes que determinan esta respuesta. Dichas dificultades se presentan principalmente en diseños que no son rotables. (Un diseño rotable es aquel en el que la varianza de la función estimada depende exclusivamente del radio de la esfera).

La idea de esta sección es presentar modificaciones al procedimiento que usualmente sigue el Análisis de Cordilleras para obtener las x' que dan origen a las \hat{Y}' óptimas.

Aquí se estudiarán dos casos:

I).- Cuando los niveles de varianza fija determinan curvas elipsoidales y

II).- Cuando el diseño se ha realizado de manera no sistemática, es decir, cuando no se ha seguido un plan experimental.

En el segundo caso se logrará reducir la varianza de \hat{Y} , restringiendo únicamente una parte de ella, la parte que contribuye en mayor grado a que esta crezca y que como se verá es la correspondiente al valor propio mas pequeño de la matriz $X^t X$.

CASO I

Se tiene un modelo de la forma

$Y = \eta + \underline{\epsilon}$ donde $E(\underline{\epsilon}) = \underline{0}$ y $E(\underline{\epsilon}^t \underline{\epsilon}) = \sigma^2 I$
con esperanza

$$\eta = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{j=1}^{k-1} \sum_{m=j+1}^k \beta_{jm} x_j x_m + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 .$$

Las variables que aquí se manejan están codificadas y el centro del diseño es el $(0, 0, \dots, 0)$.

La función ajustada es

$$\hat{Y} = b_0 + \underline{x}^t \underline{b} + \underline{x}^t \underline{B} \underline{x}$$

Con $(\underline{x}^t, \underline{b}, \underline{B})$ como se especificaron anteriormente.

η se puede escribir como $\eta = \underline{z}^t \underline{\gamma}$, entonces $\hat{Y} = \underline{z}^t \hat{\underline{\gamma}}$, donde $\hat{\underline{\gamma}}$ es el estimador por mínimos cuadrados de $\underline{\gamma}$ y además

$$\underline{z}^t = [1, x_1, \dots, x_k, x_1^2, \dots, x_k^2, x_1 x_2, \dots, x_{k-1} x_k]$$

$$\underline{\gamma}^t = [\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k, \beta_{11}, \dots, \beta_{kk}, \beta_{12}, \dots, \beta_{k-1k}]$$

Puesto que el modelo es lineal con respecto a los parámetros

$$\text{Var}(\hat{\underline{\gamma}}) = \sigma^2 (\underline{X}^t \underline{X})^{-1}$$

con \underline{X} la matriz de diseño.

$$\text{Por lo que } \text{Var}(\hat{Y}) = \sigma^2 \underline{z}^t (\underline{X}^t \underline{X})^{-1} \underline{z}$$

$$\underline{X}^t = [\underline{z}_1, \underline{z}_2, \dots, \underline{z}_n]$$

donde n es el número de corridas experimentales ($n \geq k$)

$$\text{y } \underline{z}_i^t = [1, x_{i1}, \dots, x_{i1}^2, \dots, x_{ik}^2, x_{i1} x_{i2}, \dots, x_{i(k-1)} x_{ik}]$$

$$\text{para } i = 1, \dots, n$$

Este último vector denota la i -ésima corrida experimental en las variables independientes.

Con el procedimiento usual de Análisis de Cordilleras, lo que se hace es maximizar \hat{Y} sujeta a la restricción $\underline{x}^t \underline{x} = R^2$ (\underline{x} vector k -dimensional).

Se desea añadir la condición adicional de que la varianza sea constante y más o menos pequeña en toda la esfera de radio R .

Cuando el diseño es rotatable, esto no tiene mayor problema, ya que como antes se mencionó la varianza sólo depende del radio de la esfera y bastará con ir restringiendo \hat{Y} a esferas de radio suficientemente pequeño.

Pero si el diseño no es rotatable, la varianza puede comportarse de manera no uniforme sobre la esfera y como consecuencia, acarreará malas estimaciones del máximo \hat{Y} y de las condiciones de \underline{x} para obtener dicho máximo.

Se debe intentar minimizar el papel de la $\text{var}(\hat{Y})$ en la creación de incertidumbre en la estimación. La

manera en que se hace es optimizando \hat{Y} sobre curvas de varianza constante.

Es decir se optimiza \hat{Y} sujeta a

$$\underline{z}'(X'X)^{-1}\underline{z} = 1^2.$$

Se dará un tratamiento para diseños elipsoidales, no sin antes mencionar que en la práctica, cuando el plan del diseño es modificado o simplemente se carece de algún plan, es difícil obtener diseños rotables o elipsoidales.

Un diseño es elipsoidal si $\text{Var}(\hat{Y}) = \psi(X'AX)$ donde ψ es una función de $X'AX$, A es definida positiva y simétrica.

Los diseños rotables son casos especiales de los diseños elipsoidales cuando A es la matriz identidad.

Usar Análisis de Cordilleras Estándar cuando el diseño es elipsoidal pero no rotable, puede llevar a salir rápidamente de la región experimental usada para calcular los estimadores de los parámetros sobre todo cuando esta región es muy angosta, produciendo graves trastornos en la varianza de la respuesta. Aún mas, al estar fuera de la región experimental difícilmente se podría conocer esta varianza.

Ya se había propuesto optimizar \hat{Y} sujeta a que $\text{var}(\hat{Y}) = \sigma^2 1^2$ en diseños elipsoidales, esto es equivalente a optimizar \hat{Y} sujeta a que $X'AX = a^2$, donde a^2 es una constante. Para el caso en que se trabaje con un diseño rotable, el método modificado de Análisis de Cordilleras coincide con el método estándar.

En el capítulo II se mencionó que existe una matriz ortogonal P tal que

$$A = P^t \text{Diag}(\lambda_i) P.$$

P es una matriz formada por vectores propios de A, cada uno correspondiente a un valor propio de A.

$\text{Diag}(\lambda_i)$ es una matriz diagonal formada con los valores propios de A.

$$\text{Sea } \underline{v} = \text{Diag}(\sqrt{\lambda_i}) P \underline{x}, \quad \underline{c} = \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_i}) P \underline{b} \quad \text{y}$$

$$\underline{C} = \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_i}) P B P^t \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_i})$$

entonces

$$\hat{Y} = b_0 + \underline{w}'c + \underline{w}'C\underline{w}$$

ya que

$$\begin{aligned} b_0 + \underline{w}'c + \underline{w}'C\underline{w} &= b_0 + \underline{x}'P^t \text{Diag}(\sqrt{\lambda_1}) \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_1}) P b + \\ \underline{x}'P^t \text{Diag}(\sqrt{\lambda_1}) \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_1}) P B P^t \text{Diag}(1/\sqrt{\lambda_1}) \text{Diag}(\sqrt{\lambda_1}) P \underline{x} &= \\ b_0 + \underline{x}'P^t P b + \underline{x}'P^t P B P^t P \underline{x} &= \\ b_0 + \underline{x}'b + \underline{x}'B \underline{x} &= \hat{Y}. \end{aligned}$$

También se tiene que

$$\begin{aligned} \underline{w}'\underline{w} &= \underline{x}'P^t \text{Diag}(\sqrt{\lambda_1}) \text{Diag}(\sqrt{\lambda_1}) P \underline{x} = \underline{x}'P^t \text{Diag}(\lambda_1) P \underline{x} = \\ -\underline{x}'A \underline{x} &= a^2. \end{aligned}$$

Logradas estas expresiones no hay más que aplicar el método de Análisis de Cordilleras usual a $\hat{Y} = b_0 + \underline{w}'c + \underline{w}'C\underline{w}$ sujeta a $\underline{w}'\underline{w} = a^2$.

Ejemplo IV.2.1 (Khuri y Myers(1979))

Considérese un modelo ajustado en dos variables x_1, x_2 . Las variables del diseño y los correspondientes valores observados de Y se dan a en la tabla IV.2.1.

TABLA IV.2.1

x_1	x_2	Y
$-3/4\sqrt{2}$	$-5/4\sqrt{2}$	16,79
$-5/4\sqrt{2}$	$-3/4\sqrt{2}$	17,34
$5/4\sqrt{2}$	$3/4\sqrt{2}$	14,88
$3/4\sqrt{2}$	$5/4\sqrt{2}$	16,43
0	0	15,00
1	1	16,00
-1	-1	18,00
$-1/4$	$1/4$	16,50
$1/4$	$-1/4$	15,00

La matriz de varianzas y covarianzas del vector de estimadores para los coeficientes de regresión es $\sigma^2(X^t X)^{-1}$ donde

$$(X^t X)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -4,25 & -4,25 & 7,5 \\ & 1,06 & -0,94 & 0 & 0 & 0 \\ & & 1,06 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 24,8 & 22,8 & -43,8 \\ & & & & 24,8 & -43,8 \\ & & & & & 81,3 \end{bmatrix}$$

El modelo ajustado es

$$\hat{Y} = 15 - 1,99x_1 + 0,99x_2 + 2,97x_1^2 + 3,97x_2^2 - 4,94x_1x_2 \quad (1)$$

Var(\hat{Y}) tiene la forma:

$$\text{Var}(\hat{Y}) = \sigma^2(1 - .875\rho^2 + .34375\rho^4) \quad (2)$$

donde $\rho^2 = 8.5x_1^2 - 15x_1x_2 + 8.5x_2^2$.

Se tiene un diseño elipsoidal, con respecto a la forma cuadrática de la matriz A donde

$$A = \begin{bmatrix} 8.5 & -7.5 \\ -7.5 & 8.5 \end{bmatrix}$$

Se sigue que

$$\text{Diag}(\lambda_1) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 16 \end{bmatrix} \quad y \quad P = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

de tal manera que

$$[w_1, w_2]^t = \frac{1}{\sqrt{2}} [x_1 + x_2, -x_1 + x_2] \quad (3)$$

que se calculó utilizando la expresión $w = \text{diag}(\sqrt{\lambda_i}) P x$.

La respuesta estimada evaluando (1) en términos de las w_i 's queda como

$$\hat{Y} = 15 - .707w_1 + .527w_2 + w_1^2 + .371w_2^2 + .25w_1w_2 \quad (4)$$

que es una forma cuadrática en C donde

$$C = \begin{bmatrix} 1 & .125 \\ .125 & .371 \end{bmatrix}$$

Después de estos cambios, hay que aplicar el Análisis de Cordilleras usual. Es decir considerar la función F con

$$F = \hat{Y} - \mu(w_1^2 + w_2^2 - a^2)$$

Los puntos estacionarios satisfacen la ecuación:

$$\frac{\partial F}{\partial w} = 0$$

Las soluciones están dadas por

$$w_1 = \frac{-.164086 - .3534\mu}{\mu^2 - 1.37\mu + .355375} \quad (5)$$

$$w_2 = \frac{-.3076875 + .2635\mu}{\mu^2 - 1.37\mu + .355375} \quad (6)$$

que surgieron del sistema de ecuaciones dado por

$$(C - \mu I)w = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} -.707 \\ .527 \end{bmatrix}$$

Recuérdese que si se desea obtener máximos de \hat{Y} ,

entonces μ debe escogerse mas grande que el mayor valor característico de la matriz C.

Los valores propios de C son: .34707 y 1.02393.

Se escogieron diez diferentes μ 's todas mayores que 1.02393. Para cada una de éstas se encontró el correspondiente máximo absoluto (w_1, w_2) sobre el círculo

$$w_1^2 + w_2^2 = a^2, \quad (7)$$

utilizando las ecuaciones (5) y (6). Se obtuvieron además las x_1 's y x_2 's de (3). Las a 's y $\sigma^{-2}\text{Var}(\hat{Y})$ se calcularon de (7) y (2) respectivamente. La respuesta estimada en términos de las w_1 's está dada por (4)

Los resultados se presentan en la siguiente tabla.

TABLA IV.2.2

μ	4.0	3.5	3.0	2.5
w_1	-0.1149729	-0.1374639	-0.17009938	-0.2264607
w_2	0.0686493	0.0787206	0.092098	0.1104708
x_1	-0.0934384	-0.1111232	-0.1371986	-0.1796697
x_2	-0.0691660	-0.0832899	-0.1046354	-0.1406104
\hat{Y}	15.130456	15.157161	15.197874	15.257882
a	0.133908	0.1584084	0.1942185	0.2519686
$\sigma^{-2}\text{v}(\hat{Y})$	0.9844206	0.9782599	0.9674833	0.9458335

μ	2.0	1.50	1.40	1.30
w_1	-0.3365082	-0.6671172	-0.8354416	-1.1231169
w_2	0.1359339	0.1595308	0.1545867	0.1325192
x_1	-0.2619904	-0.499949	-0.6181052	-0.8176316
x_2	-0.2139496	-0.4435444	-0.5634478	-0.7707765
\hat{Y}	15.418205	15.983603	16.346664	17.094578
a	0.3629266	0.6859266	0.84962325	1.130908
$\sigma^{-2}\text{v}(\hat{Y})$	0.8907125	0.6644111	0.5474945	0.4431951

μ	1.25	1.20
W1	-1.3608769	-1.7320725
W2	0.1062461	0.0566838
X1	-0.9811117	-1.234644
X2	-0.9435516	-1.214801
\hat{y}	17.838156	19.231169
a	1.365018	1.733
$\sigma^{-2} \text{var}(\hat{y})$	0.5630631	1.4726584

Ahora se maximizará la función de respuesta en términos de las variables originales sujeta a la condición $x_1^2 + x_2^2 = R^2$ para verificar de manera experimental que el método modificado produce mejores resultados que el método usual. Considere entonces

$$F^* = \hat{Y} - \theta(x_1^2 + x_2^2 - R^2)$$

La solución de $\frac{\partial F^*}{\partial X} = 0$ está dada por las ecuaciones

$$X_1 = \frac{2.7275 - .995\theta}{\theta^2 - 6.94\theta + 5.69} \quad y$$

$$X_2 = \frac{.9875 + .495\theta}{\theta^2 - 6.94\theta + 5.69}$$

Los valores propios de la matriz B

$$B = \begin{bmatrix} 2.97 & -2.47 \\ -2.47 & 3.97 \end{bmatrix}$$

son .95 y 5.99, entonces valores de θ mayores que 5.99 deben ser considerados. La tabla IV.2.2 presenta las respuestas máximas, los correspondientes valores de R, los de \hat{y} y aquellos de $\sigma^{-2} \text{var}(\hat{y})$ para 5 diferentes valores de θ^* .

TABLA IV.2.3

θ	9.5	9.0	8.5	8.0	7.5
X1	-0.2240	-0.25701	-0.302374	-0.36926	-0.478766
X2	0.18960	0.224618	0.271142	0.349153	0.475227
\hat{Y}	16.135	16.4155	16.85252	17.6063	19.1245
a	0.29354	0.341336	0.408147	0.50819	0.674580
$\sigma^2_{\hat{Y}}$	0.44641	0.560246	1.104137	3.24800	12.8516

Nótese que el valor más grande de \hat{Y} en IV.2.3 es de 19.124547 obtenido en el punto $(-0.4787664, 0.4752275)$ que cae fuera de la región experimental. También note el rápido incremento en $\sigma^2_{\hat{Y}}$ de .4464172 a 12.851665. Este resultado es causado por la magnitud de los elementos de $(X^tX)^{-1}$.

En el procedimiento modificado, el valor más grande de \hat{Y} es de 19.231169 en el punto $(-1.2348435, -1.2148018)$ (ver tabla IV.2.2) que se encuentra cercano a la periferia de la región experimental con una varianza muy pequeña de 1.4726584.

CASO II.-

En muchas ocasiones el diseño experimental sufre algunas modificaciones, es frecuente que se le agreguen puntos que son de interés o bien que el ajuste de una superficie de segundo orden se realice sin llevar a cabo un plan de diseños específico. El costo que se paga en estos casos es que la $\text{Var}(\hat{Y})$, por lo general crezca mucho. Aquí se desarrollará un procedimiento con el cual se podrá controlar el término de $\text{Var}(\hat{Y})$ que contribuye más a que esta sea grande.

Si $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p$ con $p=(k+1)(k+2)/2$, son los valores propios de X^tX y utilizando que $\text{var}(\hat{Y}) = \sigma^2 \underline{z}^t (X^tX)^{-1} \underline{z}$, se puede probar que

$$\frac{\sigma^2 \underline{z}^t \underline{z}}{\max_i v_i} < \text{var}(\hat{Y}) < \frac{\sigma^2 \underline{z}^t \underline{z}}{\min_i v_i}$$

Esta doble desigualdad refleja la dificultad que

TABLA IV.2.3

θ	9.5	9.0	8.5	8.0	7.5
X1	-0.2240	-0.25701	-0.302374	-0.36926	-0.478766
X2	0.18960	0.224618	0.271142	0.349153	0.475227
\bar{Y}	16.135	16.4155	16.85252	17.6063	19.1245
a	0.29354	0.341336	0.408147	0.50819	0.674580
$\sigma^2_{\hat{Y}}$	0.44641	0.560246	1.104137	3.24800	12.8516

Nótese que el valor más grande de \hat{Y} en IV.2.3 es de 19.124547 obtenido en el punto $(-0.4787664, .4752275)$ que cae fuera de la región experimental. También note el rápido incremento en $\sigma^2_{\text{Var}}(\hat{Y})$ de .4464172 a 12.851665. Este resultado es causado por la magnitud de los elementos de $(X^tX)^{-1}$.

En el procedimiento modificado, el valor más grande de \hat{Y} es de 19.231169 en el punto $(-1.2348435, -1.2148018)$ (ver tabla IV.2.2) que se encuentra cercano a la periferia de la región experimental con una varianza muy pequeña de 1.4726584.

CASO II.-

En muchas ocasiones el diseño experimental sufre algunas modificaciones, es frecuente que se le agreguen puntos que son de interés o bien que el ajuste de una superficie de segundo orden se realice sin llevar a cabo un plan de diseños específico. El costo que se paga en estos casos es que la $\text{Var}(\hat{Y})$, por lo general crezca mucho. Aquí se desarrollará un procedimiento con el cual se podrá controlar el término de $\text{Var}(\hat{Y})$ que contribuye más a que esta sea grande.

Si $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p$ con $p=(k+1)(k+2)/2$, son los valores propios de X^tX y utilizando que $\text{var}(\hat{Y}) = \sigma^2 \underline{z}^t (X^tX)^{-1} \underline{z}$, se puede probar que

$$\frac{\sigma^2 \underline{z}^t \underline{z}}{\max_i v_i} < \text{var}(\hat{Y}) < \frac{\sigma^2 \underline{z}^t \underline{z}}{\min_i v_i}$$

Esta doble desigualdad refleja la dificultad que

se tiene para acotar la $\text{var}(\hat{Y})$ cuando $X^t X$ tiene uno o más valores propios pequeños.

Sea $V = [v_1, v_2, \dots, v_p]$ $v_i \in \mathbb{R}^p$ $i=1, \dots, p$, una matriz ortogonal de vectores propios de $X^t X$.

Entonces

$$X^t X = V \text{Diag}(\eta_i) V^t \quad (X^t X)^{-1} = \dots \text{Diag}(1/\eta_i) V^t$$

Los valores propios de $(X^t X)^{-1}$ son $1/\eta_i$ V $i=1, \dots, p$ siempre que $\eta_i \neq 0$.

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{Y}) &= \sigma^2 \underline{z}^t V \text{Diag}(1/\eta_i) V^t \underline{z} = \\ &= \sigma^2 (\underline{z}^t v_1, \underline{z}^t v_2, \dots, \underline{z}^t v_p) \text{Diag}(1/\eta_i) (v_1^t \underline{z}, v_2^t \underline{z}, \dots, v_p^t \underline{z}) = \\ &= \sigma^2 \left(\frac{\underline{z}^t v_1}{\eta_1}, \frac{\underline{z}^t v_2}{\eta_2}, \dots, \frac{\underline{z}^t v_p}{\eta_p} \right) (\underline{z}^t v_1, \underline{z}^t v_2, \dots, \underline{z}^t v_p) = \sigma^2 \sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2 / \eta_i \end{aligned}$$

Se tiene que

$$\frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2}{\max_i \eta_i} \leq \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2}{\eta_i} \leq \frac{\sigma^2 \sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2}{\min_i \eta_i}$$

pero

$$\begin{aligned} \frac{\sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2}{\max_i \eta_i} &= \left(\frac{\underline{z}^t v_1}{\max_i \eta_i}, \frac{\underline{z}^t v_2}{\max_i \eta_i}, \dots, \frac{\underline{z}^t v_p}{\max_i \eta_i} \right) (\underline{z}^t v_1, \underline{z}^t v_2, \dots, \underline{z}^t v_p)^t \\ &= \underline{z}^t V \text{diag}(1/\max_i \eta_i) V^t \underline{z} = \frac{1}{\max_i \eta_i} \underline{z}^t V I V^t \underline{z} = \frac{\underline{z}^t \underline{z}}{\max_i \eta_i} \end{aligned}$$

Análogamente resulta que

$$\frac{\sum_{i=1}^p (\underline{z}^t v_i)^2}{\min_i \eta_i} = \frac{\underline{z}^t \underline{z}}{\min_i \eta_i}$$

de donde se desprende la desigualdad que se había propuesto para la varianza de \hat{Y} .

Las componentes de v_i se denotarán como

$v_{0i}, v_{1i}, \dots, v_{ki}, v_{i+1i}, v_{2i}, \dots, v_{ki}, v_{i+1i}, v_{i+2i}, \dots, v_{k-i, i}$

para $i=1, 2, \dots, p$.

Entonces

$$\underline{z}^t v_i = v_{0i} + \underline{x}^t \tau_i + \underline{x}^t T_i \underline{x}$$

Donde: $\tau_i = [v_{1i}, v_{2i}, \dots, v_{ki}]$ y

$$T_i = \begin{bmatrix} v_{i+1i} & v_{i+2i}/2 & & v_{k-i, i}/2 \\ & v_{2i} & & v_{2k-i, i}/2 \\ & & \dots & \\ & & & v_{ki} \end{bmatrix}$$

$$\text{var}(\hat{Y}) = \sigma^2 \sum_{i=1}^p (v_{0i} + \underline{x}^t \tau_i + \underline{x}^t T_i \underline{x})^2 / v_i$$

De esta última igualdad se ve que si se trata de optimizar \hat{Y} sujeta a curvas de nivel de varianza constante se tendrán dificultades al aplicar la técnica de Multiplicadores de Lagrange porque aparecerán términos no lineales en las variables independientes.

Se va a adoptar una solución un tanto comprometida que recupera el espíritu del Análisis de Cordilleras y también considera un control sobre la $\text{var}(\hat{Y})$.

Nótese que valores pequeños de v_i contribuyen a producir varianzas grandes en la respuesta. Entonces se va a restringir la parte de $\text{var}(\hat{Y})$ correspondiente al valor propio más pequeño de $X^t X$, denotado por η_{\min} . De esta manera la varianza de la respuesta se controlará en la región en la que se aplique el Análisis de Cordilleras.

Sean $v_{0\alpha}$, τ_{α} , T_{α} los valores de v_0 , τ , T correspondientes al valor propio más pequeño, η_{\min} , respectivamente.

Se va a optimizar \hat{Y} sujeta a que

$$v_{0\alpha} + \underline{x}^t \tau_{\alpha} + \underline{x}^t T_{\alpha} \underline{x} = r, \quad (1)$$

donde r es una constante positiva lo suficientemente pequeña como para anular el efecto del valor propio más pequeño.

Cuando T_{α} es indefinida las curvas de nivel de la forma cuadrática (1) no son ni elipses ni esferas. De esta manera la restricción solo controla a la varianza pero no tendría que considerar \underline{x} en la región de diseño entonces se añade la restricción adicional $\underline{x}^t \underline{x} \leq R^2$, donde R es lo suficientemente grande para contener al diseño experimental.

Utilizando el método de Multiplicadores de Lagrange

$$L = \hat{Y} - \mu (v_{0\alpha} + \underline{x}^t \tau_{\alpha} + \underline{x}^t T_{\alpha} \underline{x} - r) - \lambda (\underline{x}^t \underline{x} - R^2)$$

donde r es algún valor deseable para $v_{0\alpha} + \underline{x}^t \tau_{\alpha} + \underline{x}^t T_{\alpha} \underline{x}$.

Se obtiene $\frac{\partial L}{\partial x} = 0$ entonces

$$(B - \mu T_n - \lambda I)x = 1/2(\mu \tau_n - b).$$

Lo que debe hacerse es escoger valores de μ y λ apropiados para asegurar que se obtenga una respuesta óptima restringida.

Para un valor fijo de μ la matriz de segundas derivadas parciales $2(B - \mu T_n - \lambda I)$ es definida negativa si λ es mayor que todas las raíces características de $B - \mu T_n$, las λ 's con esas propiedades proporcionarán un máximo de \hat{Y} , es decir cada punto x que se obtenga dará respuesta óptima para un nivel $r = v_{0n} + x^t \tau_n + x^t T_n x$ y por supuesto para un radio fijo $R = (x^t x)^{1/2}$.

Ejemplo IV.2.2.-(Khuri y Myers (1979))

Se elaboró un experimento para una respuesta que depende de tres variables. El primer intento fue construir y usar un diseño compuesto central. Sin embargo, dificultades experimentales impidieron el uso del diseño como se había planeado inicialmente y el que finalmente se utilizó condujo a problemas de mal acondicionamiento con respecto al ajuste de una superficie de segundo orden. Los datos se presentan en la tabla IV.2.4.

TABLA IV.2.4

X1	X2	X3	Y
-1.020	-1.402	-0.998	13.5977
0.900	0.478	-0.818	12.7638
0.870	-1.282	0.882	16.2780
-0.950	0.458	0.972	14.1678
-0.930	-1.242	-0.868	9.2461
0.750	0.498	-0.618	17.0167
0.830	-1.092	0.732	13.4253
-0.950	0.378	0.832	16.0967
1.950	-0.462	0.002	14.5438
-2.150	-0.402	-0.038	20.9534
-0.550	0.058	-0.518	11.0411
-0.450	1.378	0.182	21.2088
0.150	1.208	0.082	25.5514
0.100	1.768	-0.008	33.3793
1.450	-0.342	0.182	15.4341

En este ejemplo, el valor propio más pequeño de $X^t X$ es $\eta_{min} = 0.321$.

$$\begin{aligned}
 & V_{0m} + \underline{x}^t \underline{\tau}_m + \underline{x}^t \underline{T}_m \underline{x} = \\
 & -.2935 + .0469x_1 + .48081x_2 + .4071x_3 + \\
 & (x_1, x_2, x_3) \begin{pmatrix} .1129 & .0095 & .2709 \\ .0095 & -.1382 & -.0148 \\ .2709 & -.0148 & .6453 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} .
 \end{aligned}$$

Puesto que T_m es indefinida (sus valores propios son .759, 0.0008, -0.1398) se añade la restricción

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq R^2 .$$

Para tener una idea de que valores de r que son razonables, se calculó $(\hat{\sigma}^2(V_{0m} + \underline{x}^t \underline{\tau}_m \underline{x} + \underline{x}^t \underline{T}_m \underline{x})^2) / \eta_{min}$ para cada uno de los 15 puntos del diseño. (Esta es la porción de la estimación de $\text{Var}(\hat{Y})$ correspondiente a $\eta_{min} = 0.0321$.) El valor mas grande que se encontró fué 0.66, correspondiente a un valor de 0.087 para $V_{0m} + \underline{x}^t \underline{\tau}_m \underline{x} + \underline{x}^t \underline{T}_m \underline{x}$.

Con esta información r no debería ser mucho más grande que 0.09 y R no exceder 2.0 Esta cota para R fué obtenida de evaluar la ecuación $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = R^2$ sobre cada punto del diseño experimental. El valor .09 sirve como una guía para lo que podrían considerarse valores deseables de r .

El método de Análisis de Cordilleras sin modificación se aplicó. La tabla IV.2.5 proporciona valores de \hat{Y} para diferentes \underline{x} que son soluciones de la ecuación

$$(B - \lambda I) \underline{x} = -\frac{1}{2}b$$

TABLA IV. 2.5

R	2.0	1.9749	1.944	1.744	1.4836	1.3945
\hat{Y}	57.176	56.272	55.147	48.332	40.197	37.640
VAR \hat{Y}	405.44	385.73	360.783	231.696	118.03	91.108
$\sigma^{-2} \text{Var} \hat{Y}$	145.90	138.668	129.834	83.38	42.475	32.787
X1	1.265	1.249	1.227	1.085	0.899	0.835
X2	0.936	0.9272	0.916	0.845	0.749	0.715
X3	1.232	1.2168	1.197	1.074	0.912	0.857
r	2.079	2.025	1.958	1.5533	1.0845	0.941
$\frac{r^2}{\eta \min}$	134.73	127.815	119.371	75.163	36.641	27.631

R	1.146	0.9278	0.698	0.3785	0.1396
\hat{Y}	31.085	26.229	21.365	16.021	12.796
VAR \hat{Y}	39.750	17.057	5.846	4.320	7.202
$\sigma^{-2} \text{Var} \hat{Y}$	14.305	6.138	2.104	1.554	2.592
X1	0.6598	0.5146	0.3518	0.1519	0.0371
X2	0.6179	0.5308	0.4223	0.2551	0.1027
X3	0.7048	0.5770	0.4305	0.2347	0.0869
r	0.5866	0.3372	0.1041	0.1237	0.2406
$\frac{r^2}{\eta \min}$	10.71	3.543	0.337	0.477	1.804

Aquí, por supuesto, los valores de λ fueron escogidos mayores que el valor propio más grande de B para maximizar \hat{Y} sobre una esfera de radio R. Para ilustrar la precisión de \hat{Y} en lo que ordinariamente se podrían considerar condiciones de operación recomendables, también se proporcionan valores estimados de $\sigma^{-2} \text{Var}(\hat{Y})$ en cada punto \underline{x} .

Posteriormente se encontraron las condiciones que maximizan \hat{Y} sujeta a las restricciones del Análisis de Cordilleras Modificado. Se tuvo especial atención en $R \approx 2.0$ y $r \approx 0.09$, aunque con el objeto de generar más resultados, fueron considerados valores de r mayores ,

pero no mucho mayores que .09. Los resultados se presentan en la tabla IV.2.6.

En dicha tabla aparece la varianza estimada de \hat{Y} para hacer posible una comparación con el Análisis de Cordilleras usual.

TABLA IV.2.6

R	2.098	2.000	1.9345	1.9039	1.85	1.795
\hat{Y}	49.14	46.26	44.11	42.83	40.22	37.042
VAR \hat{Y}	18.34	14.828	11.607	9.754	6.474	3.627
$\sigma^{-2} V \hat{Y}$	6.602	5.336	4.177	3.510	2.330	1.305
X1	1.060	0.965	0.820	0.750	0.6011	0.405
X2	1.810	1.7515	1.752	1.750	1.751	1.752
X3	-0.04	-0.0297	0.015	0.012	0.000	0.000
r	0.183	0.1650	0.1457	0.1259	0.086	0.047

R	1.623	1.53	1.162	0.848
\hat{Y}	37.19	35.242	27.78	22.42
VAR \hat{Y}	8.745	8.12	4.542	3.2567
$\sigma^{-2} V \hat{Y}$	3.147	2.922	1.635	1.17
X1	0.7845	0.7734	0.563	0.410
X2	1.421	1.320	1.015	0.7367
X3	0.011	0.0186	0.0632	0.0972
r	0.139	0.1357	0.0744	0.0062

Comparando entre las dos tablas se puede ver que la restricción extra sobre la "porción mayor de varianza" mejora la precisión de \hat{Y} en el óptimo estimado.

Para un radio específico, el Análisis de Cordilleras sin modificación proporciona una respuesta \hat{Y} mayor que la obtenida con el método modificado, sin embargo al comparar las r' y la $\text{var}(\hat{Y})$ de ambos procedimientos se observa una gran mejoría del segundo método con respecto al primero.

Aunque no es fácil decidir entre una respuesta mayor contra una varianza pequeña se puede apreciar una superioridad de las coordenadas proporcionadas por el método modificado que aparecen en la tabla IV.2.6.

Por ejemplo, difícilmente se podría escoger cualquier condición de operación en la Tabla IV.2.5 que indique $\hat{Y} \approx 50$ debido a las varianzas tan grandes que presenta la predicción. Por otro lado la tabla IV.2.6 revela que en un radio aproximadamente igual a 2, se obtiene $\hat{Y} = 49.143$ y $\sigma^{-2} \text{var}(\hat{Y}) = 6.602$.

Es interesante notar cuál es el impacto de la componente r de la $\text{Var}(\hat{Y})$ en el Análisis de Cordilleras. El último renglón en la tabla IV.2.5 proporciona $r^2/\eta_{\min} = r^2/0.0321$, el cuál debería ser comparado con el renglón etiquetado con $\text{Var}(\hat{Y})/\sigma^2$. Se puede ver en este ejemplo que r^2/η_{\min} determina un mayor valor de $\text{Var}(\hat{Y})/\sigma^2$.

El minimizar el efecto del valor propio mas pequeño de X^tX ayuda a prevenir el problema de multicolinealidad en Regresión. $\text{Var}(\hat{Y})$ será grande cuando η_{\min} es cercano a cero, pero si alguno de los valores propios de X^tX es cercano a cero existen dificultades para determinar la inversa de esta matriz y la de la matriz X . Esto se debe a que alguna de las columnas de X es casi un múltiplo escalar de otra. Algunas veces, aparece una matriz de diseño con estas características, si es que este no es planeado. Precisamente el objeto de esta sección es abordar el Análisis de Cordilleras cuando el diseño presenta dificultades como las que aparecen en multicolinealidad.

BIBLIOGRAFIA DEL CAPITULO

- Draper, N.R. (1963). Ridge Analysis of Response Surfaces, *Technometrics*, No.4, Vol.5, 469-479.
- Friedberg, S.H., A.J. Insel y L.E. Spence (1983) *Algebra Lineal*, Publicaciones Cultural S.A.
- Hoerl, A.E. (1964). Ridge Analysis. *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, No.50, Vol 60, 67-77.
- Khuri, A.I. y J.A. Cornell (1987). *Response Surfaces*, Marcel Dekker Inc.
- Khuri, A.I. y R.H. Myers (1979). Modified Ridge Analysis, *Technometrics*, 4, 469-579.
- Myers, R.H. (1971). *Response Surface Methodology*, Boston: Allyn an Bacon Inc.

CAPITULO V TANGENTES PARALELAS

INTRODUCCION.-

Hasta donde se ha desarrollado este trabajo, los métodos de optimización planteados han atacado el caso que más comúnmente se presenta en la práctica, para el cual la función objetivo (denotada por η) no está bien determinada, sino que incluye la existencia de un error aleatorio.

Con los métodos de Análisis de Cordilleras y Análisis Canónico, cuando η se supone cuadrática, la búsqueda del óptimo se apoyaba en gran medida en que η fuese un buen ajuste, que los puntos estacionarios siempre se podían calcular resolviendo el sistema de ecuaciones correspondiente, que los valores propios de una cierta matriz se pudieran encontrar o bien que $\hat{\eta}$ se encontraba sin cometer errores de tipo numérico.

Se presentan ahora, de manera general, otros procedimientos para la búsqueda del óptimo cuyo desarrollo no se apoya en cálculos como los mencionados antes,

-El Método de Descenso (Ascenso) por Pendiente Máxima Iterado.

-El Método de Descenso (Ascenso) por Pendiente Máxima de Tangentes Paralelas o Método de Descenso (Ascenso) Máximo TANPAR.

-El Método General de Tangentes Paralelas o Método General TANPAR.

A todos estos procedimientos simplemente se les llaman "Métodos de Tangentes Paralelas" y se estudian bajo la hipótesis de que se tienen condiciones ideales, es decir, la función objetivo η y sus derivadas están bien especificadas y no interviene error alguno, debido a experimentación o a fallas numéricas.

Posteriormente se mencionará cómo funcionan estos métodos, cuando las condiciones ideales no se cumplan.

Se discutirá sobre un caso de reiterado interés,

en el que η es una función cuadrática y muy específicamente el caso en que las curvas de nivel de η tienen forma elipsoidal, alrededor de algún punto.

La importancia de suponer que η es cuadrática radica en que las funciones bien comportadas se pueden aproximar con una función de este tipo en las zonas cercanas a los puntos óptimos. La mayor parte de la discusión que aquí se presenta es según las ideas de Buhler, Shah y Kempthorne (1964).

V.I.-DESCENSO POR PENDIENTE MAXIMA

El problema que aquí se plantea es encontrar un vector \underline{x} tal que minimice a η . Se hace el desarrollo para la minimización dejando en claro que los razonamientos para maximización se pueden plantear en forma análoga.

En el capítulo III, para resolver el problema de maximización, se tomaban desplazamientos en cada una de las coordenadas x_i del vector \underline{x} iguales a $c \frac{\partial \eta}{\partial x_i}$ (si $c < 0$ se tiene un descenso y cuando $c > 0$ se considera un ascenso). En otras palabras, el movimiento es en la dirección dada por el gradiente.

Los métodos que aquí se presentan van a utilizar la dirección del gradiente para tomar desplazamientos que no sean demasiado grandes con la finalidad de optimizar a η . El gradiente depende de las escalas elegidas por lo que los procedimientos que se van a desarrollar, en general, serán afectados por la selección de escalas. Mas adelante se discutirá sobre esto.

V.II METODO DE DESCENSO POR PENDIENTE MAXIMA ITERADO EN CASOS IDEALES

Este método aplica iteraciones sucesivas en la dirección del gradiente. Por iteración se entiende el avance en la dirección de un cierto gradiente antes de calcular un nuevo gradiente y entonces cambiar de dirección.

Una selección que se acostumbra hacer es moverse

al punto que minimiza la respuesta, sujeta a que sólo se permitan desplazamientos sobre la dirección determinada por algún gradiente (se dice en este caso que se minimiza sobre la "línea"). A esta forma de proceder se le llama método del gradiente óptimo.

Se puede ver con relativa facilidad que proceder por gradiente óptimo genera pasos sucesivos que son ortogonales.

Supóngase que la ecuación $g=0$ determina la dirección de algún gradiente (entonces $g=0$ es la ecuación de una recta) y que además se ha ubicado en el mínimo de η sujeta a $g=0$. En el siguiente iteración se hace un desplazamiento sobre la recta que pasa por este mínimo y donde un vector de dirección será $\nabla\eta$ evaluado en el mínimo (se denotará por $\nabla\eta_{MIN}$). Del capítulo I se sabe que $\nabla\eta_{MIN} = \lambda \nabla g_{MIN}$.

Ahora, ∇g_{MIN} es ortogonal a la recta $g=0$ (pues el gradiente es ortogonal a la curva de nivel), por lo tanto $\nabla\eta_{MIN}$ es ortogonal a $g=0$. De donde se concluye que la recta donde se efectuará un nuevo desplazamiento es ortogonal a $g=0$.

En el caso bidimensional los "pasos" alternantes resultan ser paralelos desde un punto de vista geométrico usual

V.III DESCENSO POR PENDIENTE MAXIMA ITERADO EN DOS DIMENSIONES CUANDO LAS CURVAS DE NIVEL SON ELIPTICAS (η CUADRÁTICA)

En este caso se supone que se dispone de un punto sobre una curva de nivel elíptica conocida. a partir de este punto se empieza a iterar en vías de alcanzar el mínimo, que está en el centro de la elipse.

Para cualquiera de los cuatro puntos localizados en los ejes principales de la elipse, con una sola iteración se llegará al mínimo. Esto se debe a que el gradiente en estos puntos tiene la misma dirección que los ejes principales y por lo tanto determina una dirección que pasa por el centro de la elipse.

Si se mide el éxito de una sola iteración por el qué tanto ha decrecido η , entonces estos cuatro puntos son llamados puntos iniciales más favorables.

Es lógico que ahora surja la pregunta de cuáles serían los puntos menos favorables. Por un argumento geométrico se puede ver que son aquéllos cuya tangente forma ángulos de 45° con los ejes principales. En estos puntos es donde será necesario el mayor número de desplazamientos en la dirección del gradiente para llegar al centro de la elipse.

Suponga que $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \dots$ son los valores obtenidos de la respuesta en iteraciones sucesivas (η_1 es la que corresponde al punto inicial). Ahora se definirá una medida de éxito para cada iteración.

Sea $\rho_k = \frac{(\eta_{k+1} - \eta_{\min})}{(\eta_k - \eta_{\min})}$, que es el cociente de las distancias a la respuesta óptima de la $(k+1)$ -ésima iteración respecto a la de la k -ésima iteración.

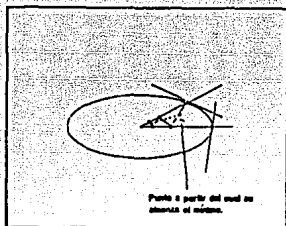
Se tiene que para todo k , $0 \leq \rho_k \leq \rho_{\max}$. Donde cero se alcanza en los casos en que se parte de los puntos más favorables y ρ_{\max} en el caso que se inicie la iteración en los menos favorables.

ρ_{\max} puede expresarse como $\rho_{\max} = (\lambda^2 - 1)^2 / (\lambda^2 + 1)$, donde λ es la razón de las longitudes del eje principal mayor entre el menor. Este resultado se debe a que el método de Descenso por Pendiente Máxima Iterado siempre converge y la razón de convergencia es precisamente ρ_{\max} . (Luenberger (1984)).

También se tiene un resultado que hace que el número de iteraciones para llegar al mínimo disminuya notablemente. Existe un punto tal que si la segunda iteración no se inicia en el mínimo sobre la línea sino en un punto más cercano al punto inicial, el mínimo global será alcanzado en esta segunda iteración. En la práctica no van a estar dadas las condiciones para determinar exactamente dónde se tiene que realizar esta segunda iteración. Lo que se recomienda hacer es calcular el mínimo sobre la línea y retroceder un

décimo de la distancia del mínimo al punto inicial. A partir de aquí se vuelve a iterar. (ver Figura V.III)

FIGURA V.III



El dibujo además de mostrar la propiedad ya conocida de que pasos alternantes son paralelos y pasos sucesivos son ortogonales, también muestra que los puntos en pasos alternantes están alineados y además están alineados con el centro de la elipse.

V.IV DESCENSO POR PENDIENTE MÁXIMA ITERADO EN N-DIMENSIONES

Con las mismas condiciones (η cuadrática y curvas de nivel elipsoidales), en el caso n-dimensional se tiene nuevamente que los puntos más favorables se ubican al final de los ejes principales de la hiperelipse.

Los puntos menos favorables resultan ubicarse en el subespacio que contiene al eje principal, más largo y al eje principal más corto de la hiperelipse. (Kantarovich (1948)).

ρ_{\max} coincide con ρ_{\max} para el caso de dos dimensiones. Sin embargo, en n-dimensiones ya no es cierto que las ρ' s coinciden.

Se ha visto que $\rho_1, \rho_2, \rho_3, \dots$ y que $\lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k = \rho_{\max}$, es decir, mientras más iteraciones se tomen, el Método de Descenso por Pendiente Máxima Iterado tiende a comportarse como si se iniciara en los puntos menos favorables.

Debido a que la convergencia de este método es

lenta, se ha desarrollado el siguiente procedimiento para acelerarlo. Se toma a \underline{x}_{k+1} de tal manera que minimice a η sobre la recta determinada por los puntos \underline{x}_k y \underline{x}_{k-2} . De aquí que $\underline{x}_{k+1} = \beta \underline{x}_k + (1-\beta) \underline{x}_{k-2}$.

En el caso de dos dimensiones se vio que \underline{x}_k , \underline{x}_{k-2} y el origen están alineados, de esta manera \underline{x}_{k+1} será el centro de la elipse.

Para n-dimensiones, si \underline{x}_{k-2} cae en un subespacio dos-dimensional que contiene a los ejes principales mas largo y mas corto, los siguientes puntos también caerán en este subespacio, con lo que \underline{x}_{k+1} será un punto correspondiente a un mínimo. Si \underline{x}_{k-2} está cerca de este subespacio entonces \underline{x}_{k+1} debe estar cercano al mínimo.

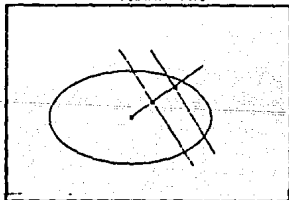
Esta modificación recibe el nombre de Método de Descenso Máximo de Tangentes Paralelas o Método de Descenso Máximo TANPAR.

En dos dimensiones este procedimiento resalta mucho por la velocidad de convergencia. Un mecanismo que también converge a gran velocidad es el siguiente:

Se trazan dos cuerdas paralelas sobre la elipse dada, se minimiza η sobre cada una de ellas y resulta que el mínimo se alcanza en el punto medio de la cuerda. La siguiente iteración sería minimizar η sobre la recta que pasa por los puntos medios.

Por el Teorema de Cuerdas Paralelas, esta recta pasa por el centro de la elipse, por lo que la última iteración planteada lleva al mínimo global. (ver figura V.4.1).

FIGURA V.4.1



Este procedimiento conocido como Método de Finkel,

denota el valor inicial y η' el valor alcanzado al final del paso acelerado, entonces:

$$(\eta' - \eta_{\min}) / (\eta_1 - \eta_{\min}) \leq (\lambda^2 - 1)^4 / (\lambda^4 + 6\lambda^2 + 1)^2$$

Donde λ es la razón de longitudes del eje mayor entre el eje menor. (Buhler, Shah, Kempthorne (1961) y Birman (1956)).

Se comparará $(\eta' - \eta_{\min}) / (\eta_1 - \eta_{\min})$ para el caso en que η' se sustituye por un paso de descenso por pendiente máxima denotado por η_4 .

Hasta este momento se han calculado $\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4$

$$\rightarrow \frac{(\eta_4 - \eta_{\min})}{(\eta_1 - \eta_{\min})} = \frac{(\eta_4 - \eta_{\min})(\eta_3 - \eta_{\min})(\eta_2 - \eta_{\min})}{(\eta_3 - \eta_{\min})(\eta_2 - \eta_{\min})(\eta_1 - \eta_{\min})} \leq \rho_{\max}^3$$

Ya que

$$\frac{(\eta_k - \eta_{\min})}{(\eta_1 - \eta_{\min})} \leq \rho_{\max} = (\lambda^2 - 1)^2 / (\lambda^2 + 1)^2.$$

Por lo tanto

$$\frac{(\eta_4 - \eta_{\min})}{(\eta_1 - \eta_{\min})} \leq (\lambda^2 - 1)^6 / (\lambda^2 + 1)^6$$

Comparando $(\lambda^2 - 1)^4 / (\lambda^4 + 6\lambda^2 + 1)^2$ y $(\lambda^2 - 1)^6 / (\lambda^2 + 1)^6$ para valores de $\lambda=2, 3$ y 10 se obtiene en el primer caso $0.0483, 0.221, 0.853$ respectivamente y en el segundo caso $0.0467, 0.263$ y 0.884 . Se ve que el método acelerado es mejor para los casos $\lambda=3$ y $\lambda=10$ y el método normal para $\lambda=2$. Cuando λ es cada vez mayor, el método acelerado se compara favorablemente con el método normal.

Por estos argumentos y por la convergencia rápida en dos dimensiones, para un método general resulta razonable iniciar con dos descensos máximos vía gradiente y un paso acelerado seguidos por una continuación lógica.

Se inicia con P_0 ; luego se obtienen P_2 y P_3 por descenso por pendiente máxima, es decir, con base en la dirección del gradiente (P_1 no aparece por comodidad en el manejo de subíndices), P_4 se calcula a través de un paso acelerado, esto es, como el mínimo en la línea que pasa por P_2 y P_3 .

Se calculan P_5, P_6 y P_7 de la misma manera que se calcularon P_2, P_3 y P_4 respectivamente.

7.3.- COMENTARIOS RESPECTO A LA DEPENDENCIA DE ESCALAS

Si $n=2$ y las curvas de nivel de η son circulares para una cierta escala, el Método de Descenso Máximo Iterado alcanzará el mínimo en un solo paso. Esto por supuesto no ocurre cuando es el caso en que las curvas de nivel son elipses (excepto si se ésta en alguno de los cuatro puntos mas favorables mencionados antes).

De esta manera si ía escala determina curvas de nivel elípticas, serán necesarias más iteraciones. Esto implica que la velocidad de convergencia del Descenso Máximo Iterado, no es invariante ante escalas.

El experimentador debería buscar una escala que determinara curvas de nivel esféricas. Se trata de adivinar qué escala determina derivadas parciales con casi la misma magnitud alrededor del óptimo, buscando de esta manera que la superficie decrezca con la misma velocidad en todas las direcciones. Con esto se esperaría que fuesen necesarias pocas iteraciones para alcanzar el mínimo.

Se ha tratado de generar el mismo efecto alrededor del punto inicial ya que el óptimo no está bien determinado. Sin embargo, tratar de llevar a cabo esta alternativa, sin importar si se toma el óptimo o el punto inicial es poco factible que se logre.

Desgraciadamente el experimentador frecuentemente se verá en la necesidad de seleccionar una escala. Una buena selección, en general lo llevará a un buen desarrollo de los métodos que aquí se presentaron (por ejemplo, convergencia veloz).

Una mala selección de escalas puede acarrear problemas aunque parece ser que los algoritmos Partan son menos sensibles a esta selección que el algoritmo de Descenso por Pendiente Máxima Iterado. Un argumento para pensar esto es el caso dos dimensional en el que aunque las elipses sean muy alargadas Descenso por Pendiente Máxima Partan converge en 3 pasos sin

importar qué punto inicial se haya considerado.

Estos argumentos perderán fuerza en los casos no ideales (que han sido los mas abordados en los capitulos anteriores de este trabajo), en los cuales la respuesta η podría ser estimada por η ; al hacer esta sustitución, quizá en el punto P_{2n} no se logre aún el mínimo. Una opción cuando se use TANPAR GENERAL, es poner a P_{2n} como P_0 y aplicar nuevamente el algoritmo con este nuevo punto inicial.

Cuando se aplica TANPAR CON DESCENSO MAXIMO, lo que se debe hacer es continuar moviéndose en la dirección del gradiente e ir tomando los correspondientes pasos acelerados.

Existe cierta evidencia de que en estos casos donde las condiciones no son ideales, ni siquiera cuadráticas los algoritmos Partan tienen una ejecución aceptable siempre que los errores en calcular a η y a sus derivadas se mantengan pequeños.

V.7.- MINIMIZACION EN LA LINEA

De la exposición de los métodos de Tangentes Paralelas, no resulta muy claro como se podría llevar a cabo la minimización de la función en una cierta dirección. Note que esta dirección puede estar dada por un vector (caso Descenso por Pendiente Máxima Tanpar) o bien por ciertos planos (Tanpar General).

En la práctica un método muy utilizado es el Descenso por Pendiente Máxima Tanpar. En esta sección se esbozará una propuesta de como se podría minimizar en la línea cuando se aplica este método.

El problema entonces es cómo determinar los puntos mínimos (máximos) sobre las direcciones de descenso (ascenso) máximo o sobre los vectores $P_n P_{n-1}$, cuando se da el paso acelerado. Para resolver esto, se presenta un algoritmo que se apoya en la conocida Búsqueda de la Sección Dorada.

Considere un intervalo $[0, P]$ y suponga que en el interior de éste se encuentra el punto donde se minimiza la función.

El primer paso en la búsqueda dorada es determinar A, B y C sobre \overline{OP} de tal manera que se cumplan las siguientes relaciones:

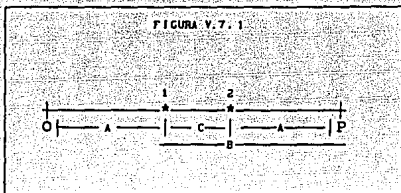
$$\frac{A}{B} = \frac{B}{A+B} \quad \frac{C}{A} = \frac{A}{A+C}$$

y además:

$$A = \frac{1+\sqrt{5}}{2} C \approx 1.618C \quad B = \frac{1+\sqrt{5}}{2} A \approx 1.618A$$

El número $\frac{1+\sqrt{5}}{2}$ es conocido como ϕ . Este es el límite de la sucesión de Fibonacci.

FIGURA V.7.1

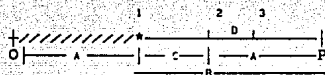


Sobre cada uno de los puntos O, P, 1 y 2 de figura V.7.1 se debe obtener el valor de la respuesta (ya sea experimentalmente o si se conoce analíticamente la función, con tan sólo evaluarla). Si se supone que el mínimo es único, que en 2 o en P resultó un valor menor que en en los demás puntos, entonces el mínimo debe encontrarse en el intervalo (1,P]. La razón de esto es que siempre que se tenga un procedimiento de búsqueda para el mínimo en donde se hayan tomado k observaciones x_1, x_2, \dots, x_k con $x_1 \leq x_2 \leq \dots \leq x_k$ y tales que para algún j con $j \in \{1, 2, \dots, k\}$ suceda que $f(x_j) \leq f(x_i)$ para toda $i=1, 2, \dots, k$, si f es continua y el mínimo es único entonces el mínimo debiera estar en el intervalo $[x_{j-1}, x_{j+1}]$. (Luenberger (1984)).

De esta manera queda desechado el intervalo (0,1] (figura V.7.2) y el próximo paso en la búsqueda dorada será determinar un valor D tal que $\frac{D-C}{C} = \frac{C-A}{D+C}$ con $C = \frac{1+\sqrt{5}}{2}D$, posteriormente experimentar en el punto 3 (Ver figura V.7.2), comparar el resultado con el de los puntos 1, 2, P y desechar el intervalo correspondiente.

Es decir se procederá exactamente del mismo modo que la primera vez, pero ahora el segmento $\overline{1P}$ jugará el papel de \overline{OP} , "C" el de "A" y "D" el de "C" y así se continuaría sucesivamente si se quisiera acotar el mínimo con mayor precisión.

FIGURA V. 7.2



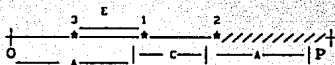
En el caso que, por ejemplo, al comparar los resultados de los experimentos en 0, 1, 2 y P se obtuviera que la respuesta menor se alcanza en 1 o en 0 se desearía al intervalo (2,P] para trabajar con [0,2] de manera análoga a como se hizo con (1,P], es decir se tendría que determinar un valor E tal que

$$\frac{E-C}{C} = \frac{C}{C+E} \frac{C}{A}$$

con

$$C = \frac{1+\sqrt{5}}{2} E$$

FIGURA V. 7.3



Después en el punto 3 de la figura V.7.3 se hace un experimento y se comparan las respuestas en 0, 3, 1 y 2 en 3. Permanece el intervalo [0,1] si el valor de la respuesta en 3 o en 0 es la menor o bien con [3,2] si la respuesta de 1 o la de 2 fue menor.

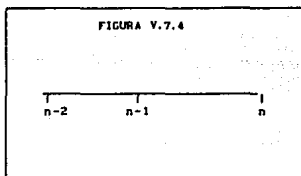
Note que en cualquier paso de la Búsqueda de la Sección Dorada el intervalo en el que se esté trabajando tendrá exactamente la misma estructura que el intervalo [0,P] tiene al ser dividido por los experimentos 1 y 2.

La pregunta que ahora surge es: ¿ Cómo se aplica

la búsqueda de la sección dorada al problema de minimizar una función a lo largo de una dirección dada por algún vector?

Primero, se debe tomar una observación a una distancia arbitraria del origen del vector. Si el valor de la respuesta en la observación resulta ser menor que la función evaluada en el origen del vector, la distancia inicial se multiplica por φ y se mide la respuesta en este nuevo extremo.

Si después de haber seguido multiplicando por φ y de haber llevado a cabo varias observaciones la n -ésima observación resulta en un crecimiento de la función, entonces el mínimo se encuentra en el intervalo dado por la observación $n-2$ y la observación n . La forma de este intervalo sería como se muestra en la figura V.7.4



Dicho intervalo está dividido exactamente como el intervalo $[0, P]$, por lo que se puede aplicar el método de la búsqueda por sección dorada hasta que se obtenga el grado de precisión que se considere conveniente.

Si en la primera observación tomada se tiene un crecimiento de la función en lugar de un decremento, entonces la distancia inicial se divide entre φ^2 hasta que se tenga una caída de la función. En este momento ya se podría intentar usar la búsqueda de la sección dorada.

Una desventaja de aplicar el procedimiento de la búsqueda de la sección dorada al problema de minimizar en la línea, es que se requiere un gran número de experimentos para obtener exactamente el óptimo

buscado. Esto ocasiona que todo el método de descenso por pendiente máxima Tanpar sea más lento. De hecho, se puede probar que la convergencia de la búsqueda dorada es lineal con radio de convergencia $1/\phi$ y dentro de los métodos que generan un intervalo para el mínimo, el de la búsqueda dorada genera un intervalo de menor longitud. (Luenberger (1984)).

Cuando uno se encuentra en condiciones ideales (función objetivo cuadrática, que se puede evaluar sin errores al igual que sus derivadas.), se debe tratar de aproximar los mínimos en la línea con un buen grado de precisión. Sin embargo cuando las condiciones están alejadas de un caso ideal la experiencia ha indicado que errores en el cálculo de mínimos en la línea van a ayudar a que el método tenga una mayor velocidad de convergencia global. Claro que para dar sólo una aproximación al mínimo no es necesario tomar muchas observaciones al aplicar la sección dorada.

Para funciones no lineales se ha visto que después de haber ubicado el intervalo donde se aplica la sección dorada son necesarias de una a cinco observaciones. (Por ejemplo $F = 100(x_2 - x_1)^2 + (1 - x_1)^2$ Harkins (1964)).

Para el número de observaciones que se deben tomar no se ha dado una regla general, pero se han presentado casos en dos dimensiones, cuando las condiciones son lejanas de un caso ideal, en que con un experimento es más que suficiente. Esto sobre todo se ha visto cuando la función objetivo tiene una cordillera; al tomar una sola experimentación el error tan grande cometido en calcular el mínimo en la línea ha hecho que el paso acelerado determine una mayor disminución de la función.

En casos donde hay más dimensiones y la función objetivo tiene curvas de nivel suaves (es decir la función objetivo tiende en cierta forma a condiciones ideales), se han llegado a usar 5 observaciones para

calcular el mínimo en la línea.

También se debe mencionar que la distancia inicial para tomar la primera observación tiene un peso importante en el número de experimentaciones necesarias antes de obtener un intervalo donde se localice el mínimo.

El Método de Descenso por Pendiente Máxima Tanpar involucra el cálculo de la dirección de máximo descenso. Si las derivadas son conocidas y se pueden evaluar sin error, esta dirección de máximo descenso se puede conocer sin problema.

Por supuesto la mayoría de los casos de interés no presentan esta posibilidad.

A continuación se presenta un procedimiento que servirá para encontrar la dirección de máximo descenso que no depende del cálculo de las derivadas (para obtener la del máximo ascenso solo hay que cambiar el signo a la de máximo descenso).

Este procedimiento se debe a Zellnik (1962) y consiste en lo siguiente.

- 1) Establecer un rango R_i para cada variable X_i
- 2) Evaluar:

$$\Delta F_i = F(X_1, X_2, \dots, X_i + \alpha R_i, \dots, X_n) - F(\underline{x})$$

donde α es un número real pequeño y ΔF_i se puede pensar como una aproximación a $\frac{\partial F}{\partial X_i}$.

- 3) Las perturbaciones iniciales a lo largo del vector de descenso por pendiente máxima son evaluadas de la relación:

$$\vec{\delta} = \beta \cdot \vec{R} \cdot \Delta F / |\Delta F|_{\max}$$

donde β es un escalar usado para determinar el tamaño del paso. Por lo general $\beta = 1/10$.

- 4) Se hace un desplazamiento a $\underline{x} - \vec{\delta}$, (primer paso).

Si el primer paso resulta exitoso, es decir, que en verdad la respuesta disminuye con respecto al valor obtenido tras evaluar en el origen del vector, entonces se debe calcular $\beta = \varphi \beta$ y continuar con este proceso

hasta que algún paso haga que la función crezca. Después de esto ya se puede aplicar el Método de la Sección Dorada al intervalo que contiene al mínimo.

Si en el paso inicial la respuesta fuera mayor que el valor de la función evaluado en el origen del vector entonces $\beta = \beta/\varphi^2$. Se debe proseguir así hasta que el paso resulte en una caída del valor de la función.

β no se disminuye tanto como se aumenta. Esto tiene la ventaja de que si los valores de la función se acercan al mínimo cuando se divide β entre φ^2 la longitud cada vez menor de los pasos dará una mayor aproximación al mismo.

El criterio de decisión para no tomar valores de β más pequeños es :

Si $\beta < c$ donde $c > 0$ una constante escogida de manera conveniente, el óptimo sería el vector \underline{x} inicial (algunos de los valores mas utilizados son, cuando las curvas de nivel son suaves, $c=10^{-2}$, $c=10^{-4}$).

Por otro lado si β no crece mucho cuando se multiplica por φ , entonces se pueden tener problemas de convergencia, si el óptimo está lejos de donde se está aplicando el método. El valor $\beta=.1$ tiene indicios de salvar este problema.

De manera natural uno se podría preguntar como proceder si se da un paso acelerado. A partir del punto P_m (m -impar) se suma el vector $\frac{1}{3}(P_m - P_{m-3})$. En el extremo final de esta suma se toma una observación, si hay un decrecimiento con respecto a P_m se empieza a multiplicar por φ hasta que se genere un intervalo que contenga al mínimo. A partir de aquí se aplicaría la Búsqueda de la Sección Dorada. Si la primera observación tomada resulta en un crecimiento de la función, como máximo se pueden hacer dos contracciones (es decir dos divisiones entre φ^2). Si aún así no se tiene algún éxito se reinicia Tanpar a partir de P_{m-1} .

Harkins (1964) creador de este algoritmo para aplicar Descenso (Ascenso) Máximo Tanpar, menciona que

su experiencia lo ha llevado a preferir reiniciar Tanpar a partir de P_{n-1} que a tratar de averiguar que ocurre, en el vector que va de P_{n-3} a P_n . (Es decir no se hace búsqueda de P_{n-3} a P_n).

Por la forma en como aquí se planteó el minimizar a lo largo de una dirección de descenso por pendiente máxima o una dirección dada por algún paso acelerado, uno podría pensar que Descenso por Pendiente Máxima Tanpar tiende a tener ciclos sin fin.

Por ejemplo, al minimizar sobre un descenso por pendiente máxima, podría ser que al estar multiplicando por φ la función decrezca sin cota. Esto, claro, depende de la función objetivo que se esté tomando, pero es lógico que si ésta tiene mínimo no va a poder decrecer sin cota en alguna dirección dada por algún vector. Si por el contrario se tienen puros aumentos de la función al estar dividiendo entre φ^2 , se llegaría a la contradicción de que en la dirección de máximo descenso la función sólo crece. (De todos modos cuando $\beta < c$, el proceso se detiene.) Si se toma un paso acelerado y se quiere minimizar, uno esperaría no tener crecimientos de la función en forma indefinida al multiplicar por φ , si es que la función objetivo tiene mínimo. Note que al dividir entre φ^2 cuando se minimiza en el paso acelerado, a lo más se permiten dos contracciones.

El procedimiento de Descenso por Pendiente Máxima Tanpar se ha ensayado en casos lejanos de ser ideales. Por ejemplo, en funciones de la forma

$$F = \sum_{j=1}^k r_j^2$$

Con $r_j = f_j(x_1, x_2, \dots, x_n)$ donde f_j se ha escogido de tal manera que F no sea cuadrática.

El comportamiento del Descenso por Pendiente Máxima Tanpar en estos casos ha sido un tanto errático ya que en las primeras iteraciones se muestra un decrecimiento muy pequeño de F , sin embargo, el que no

se calculen los mínimos en la línea en forma exacta ha contribuido a mejorar la convergencia global del procedimiento, ya que después de 30 o 40 evaluaciones de la función, llega un momento en que el proceso de optimización se acelera lo suficiente como para proporcionar estimaciones buenas del óptimo y del valor mínimo de la función. (Harkins (1964)).

Las funciones como F se han manejado con otro procedimiento conocido como técnica Gaussiana. Aun cuando esta técnica resulta ser más sofisticada requiere de un menor número de evaluaciones de la función para lograr resultados equiparables a Tanpar; a pesar de esto, parece ser difícil encontrar otra técnica tan simple como Descenso por Pendiente Máxima Tanpar y que además arroje buenas aproximaciones del óptimo.

US.- OBSERVACIONES FINALES A LOS METODOS TANPAR.-

Los procedimientos Tanpar tienen posibilidades de ser programables, en ningún momento involucrán cálculos de segundas derivadas.

Cuando se dan condiciones ideales los métodos Tanpar convergen en a lo más $2n$ iteraciones. Si uno está cerca de tener condiciones ideales se esperaría que el número de iteraciones para calcular el óptimo fuese cercano a $2n$.

Un caso de interés de condiciones ideales aproximadas es aquel que surge cuando se va a aplicar Análisis Canónico, en donde se considera a Y cuadrática y \hat{Y} un muy buen ajuste a Y . Sería interesante averiguar que resultados se obtendrían si se aplicara Tanpar a \hat{Y} cuando es imposible aplicar Análisis Canónico por cuestiones técnicas (por ejemplo, dificultades con las inversas de las matrices).

Tanpar tiene la ventaja de que se puede trabajar sin necesidad de plantear un modelo para la función de respuesta. Esto ocurre cuando todas las evaluaciones de la función objetivo se obtienen en forma

experimental.

El no proponer un modelo evita por completo la necesidad de tener que hacer una regresión, pero a cambio de esto se tendrá que hacer un experimento cada vez que se necesite evaluar la función.

Una de las críticas que se hace , por ejemplo a Descenso por Pendiente Máxima Tanpar es que los casos ideales con que se desarrolló se piensa que se manejan lo suficientemente bien con Descenso por Pendiente Máxima Simple.

En oposición con este punto de vista, empíricamente los algoritmos Tanpar tienen un comportamiento regularmente bueno en casos no ideales, algo que no ocurre con Descenso por Pendiente Máxima Simple.

En la sección siete de este capítulo se propuso el método de la Búsqueda de la Sección Dorada también conocido como Método de Fibonacci para encontrar el "mínimo en la línea", otra alternativa que se ha propuesto es que cuando se tenga ubicado el intervalo para el valor mínimo de la función se ajuste una función cuadrática y se encuentra el mínimo de esa función cuadrática. (Burden (1985), Luenberger (1984)).

Se puede dar uno cuenta que cuando hay casos cercanos a tener condiciones ideales, la alternativa de ajustar una función cuadrática puede resultar mejor que la aplicación del método de Fibonacci.

En presencia de casos extremadamente no ideales (que la función objetivo presente exponenciales, sumas de exponenciales, términos lineales y cuadráticos juntos) resulta mejor continuar iterando de acuerdo a las reglas de los algoritmos de Tangentes Paralelas que detenerse y volver a inicializar todo el procedimiento. La gente que ha trabajado Tanpar en forma práctica opina que Tanpar continuo involucra una especie de error aleatorio que depende de todas las iteraciones que se han llevado a cabo. Empíricamente parece ser

que este error, impide, al aplicar los procedimientos ,
que éstos presenten alguna especie de "loop".

BIBLIOGRAFIA DEL CAPITULO

- Beale, E.M.L. (1988). *Introduction to Optimization*, New York: John Wiley.
- Birman, M.S. (1950). *Uspehi Mat. Nauk*, 5, 152.
- Buehler, R.J., B.V. Shah y O. Kempthorne (1961), Technical Report No. 3, Statistical Lab., Iowa State Univ., Ames, Iowa.
- Buehler, R.J., E.V. Shah y O. Kempthorne (1964). *Methods of Parallel Tangents, Chemical Engineering Progress Symposium Series*, No. 50, Vol. 60, 1-7.
- Burden, R.I., J.D. Faires (1985). *Análisis Numérico*. Jera Ed., Grupo Editorial Iberoamericana.
- Harkins, A. (1964). *The Use of Parallel Tangents in Optimization, Chemical Engineering Progress Symposium Series*, No. 50, Vol. 60, 35-40.
- Kantorovich, L.V. (1948). *Uspehi Mat. Nauk*, 3, 89.
- Luenberger, D.G. (1984). *Linear and Nonlinear Programming*, 2da Ed., Addison-Wesley Publishing Co.
- Zellnik, H.E., K.E. Sondak y R.S. Davis (1962). *Chemical Engineering Progress*, No.8, Vol. 58, 35-41.

CONCLUSIONES

Ahora se describe una metodología general al problema de Superficie de Respuesta en donde se incorporan las técnicas explicadas en este trabajo.

1.- Definir los objetivos de la investigación. En este punto se debe estar seguro que el problema por resolver involucra el estudio de una variable Y (cuantitativa) que depende de las variables x_1, x_2, \dots, x_k (también cuantitativas) y es de interés el conocimiento de condiciones sobre x_1, x_2, \dots, x_k que determinen respuesta óptima en Y .

Si la relación entre la respuesta y las variables independientes es completamente conocida, se deben aplicar técnicas de optimización dentro del campo del Cálculo Diferencial, de la Investigación de Operaciones o quizá del Análisis Numérico.

Si la relación a estudiar involucra un error aleatorio, lo primero que se debe hacer es seleccionar las variables independientes que tengan mayor efecto en la respuesta. Es posible aplicar algunas técnicas estadísticas para lograr esta selección si con anterioridad se ha ajustado algún modelo lineal de Regresión que relacione la respuesta con todos las variables de interés (Draper y Smith (1981)). En caso de no disponer de un ajuste de este tipo, sólo se dispone de la información que da el contexto del problema en vías de lograr esta selección. Después, hay que especificar los rangos tanto de la respuesta como de las variables independientes y verificar que la escala sea continua.

2.- Construir un diseño de primer orden, experimentar, recoger datos y ajustar un modelo de primer orden.

¿Porqué un diseño y un modelo de primer orden? Recuérdese que, por lo general, la región inicial de experimentación no contiene al óptimo y suponer un

función monótona en esta zona resulta conveniente. Dentro de la clase de todas las funciones monótonas, los modelos de primer orden resultan ser de los más sencillos, lo cual es adecuado en etapas iniciales de experimentación

¿Cual diseño de primer orden? Se podría usar un 2^k , una fracción de un 2^k o bien un diseño simplex. En los 2^k , $X^t X$ es una matriz diagonal (esto quiere decir que el diseño es ortogonal), con X la matriz de diseño. Si las componentes del vector de parámetros se estiman via Mínimos Cuadrados estas son no correlacionadas y de varianza constante. Esto permite que los calculos para desarrollar pruebas de hipótesis sobre el vector de parámetros (bajo normalidad) se simplifiquen. (Myers (1971) Cap. III). Los diseños Simplex formados por $k+1$ observaciones, son tales que al trazar líneas k dimensionales que unan a los puntos del diseño se obtiene una figura regular k -dimensional o simplex. Estos resultan interesantes debido al resultado del Capítulo III, Sección 2 de este trabajo que tiene que ver con la estimación óptima del gradiente. Tambien son diseños ortogonales y heredan las propiedades respecto a ortogonalidad que presentan los 2^k . (Méndez (1977)).

Respecto al ajuste, cabe mencionar que no necesariamente se debe realizar por Mínimos Cuadrados. Existen métodos alternativos de estimación, que se comparan favorablemente respecto a Mínimos Cuadrados, por ejemplo estimación a través del criterio del Error Cuadrático Medio Integrado (Integrated Mean Square Error) presentado en Khuri y Cornell (1987), Cap. VI.

3.- Realizar prueba de Carencia de Ajuste. Si se esta usando un diseño 2^k o un diseño simplex, será necesario que al experimentar se tomen repeticiones. Usualmente lo que se hace es incluir el centro del diseño como un punto del mismo y tomar varias obsevaciones en él para poder calcular el error puro.

La prueba de Carencia de Ajuste es crucial en el problema de Superficie de Respuesta ya que el objetivo es dar una predicción del valor óptimo usando el modelo ajustado. Claro que las condiciones en las variables independientes donde se alcanza este valor son desconocidas y es necesario que se determinen antes de dar una predicción.

4.- Si la prueba del punto 3 da evidencia de Carencia de Ajuste, se podrían intentar transformaciones en las variables y/o respuesta. Estas transformaciones deben ser monótonas para que sea equivalente optimizar el modelo transformado y el modelo original. En caso de no haber Carencia de Ajuste se aplican las técnicas estadísticas descritas por 6.

5.- Se ajusta el nuevo modelo (sin volver a experimentar) y se verifica Carencia de Ajuste. Si la Carencia de Ajuste es evidente, se recomienda usar una estrategia de segundo orden, su descripción se hace en 8. Si no hay se pasa a 6.

6.- Aplicar la teoría usual del Análisis de Regresión que incluye entre otras cosas la verificación de los supuestos sobre los residuales, construcción de intervalos o regiones de confianza y la elaboración de pruebas de hipótesis para el vector de parámetros. La teoría de Regresión más conocida se apoya en el supuesto de normalidad sobre los residuales y esto implica que las estadísticas para las pruebas de hipótesis sobre los parámetros tengan una distribución F. Cualquier desviación sobre la hipótesis de normalidad hace que las estadísticas de prueba no necesariamente tengan una distribución F, pero en muchos casos la aproximación a una F puede ser buena. El grado de aproximación depende en parte del diseño usado para hacer el ajuste. Un diseño seleccionado con la finalidad de que esta aproximación sea adecuada se dice que es un diseño robusto contra la no normalidad y

si el modelo es lineal en los parámetros, se dice entonces que el modelo se selecciona a través del criterio Box-Watson. Khuri y Cornell (1987) plantean una discusión sobre este criterio y proponen un diseño que lo satisface. Esto da cierta flexibilidad en el manejo de la teoría de Regresión.

Cuando todas estas técnicas dejan ver que el modelo no es adecuado habría que regresar a la etapa de selección de variables independientes y construcción de un diseño de primer orden. Se debe considerar la posibilidad de tomar más observaciones experimentales y/o expandir el diseño. Si el modelo es útil habría que iniciar con la aplicación de los métodos de Superficie de Respuesta como se explica en 7.

7.- Usar método de Ascenso por Pendiente Máxima. Se sugiere el método modificado del capítulo III, sección 2. Si no se detecta curvatura evidente se vuelve a utilizar una estrategia de primer orden como en 2. En caso de curvatura evidente hay que utilizar la estrategia de segundo orden que se describe en 8.

8.- Se plantea un diseño de segundo orden, se experimenta, se recogen los datos y se ajusta el modelo correspondiente.

Podría usarse un 3^k que presenta tres niveles en cada variable independiente y permite la estimación de los parámetros correspondientes a los términos de segundo orden. Sin embargo, no se debe olvidar que uno de los criterios para la selección de un diseño es la reducción de cálculos en la estimación. Por esto con k grande un 3^k resulta inadecuado.

Como alternativa se tienen los diseños Compuestos Centrales con menos observaciones y poca pérdida de precisión en la estimación. Estos diseños están formados por un 2^k con $2k + 1$ puntos que son: el origen del diseño y los puntos de la forma $(0, \dots, \alpha, \dots, 0)$, $(0, \dots, -\alpha, \dots, 0)$, $i=1, \dots, k$, llamados axiales. Para algunos valores de α estos diseños resultan ser

ortogonales, minimizan tanto la varianza de la respuesta como los posibles sesgos que pueden presentar los estimadores debidos a que el modelo verdadero sea de tercer orden y no de segundo. Tambien se acostumbra tomar repeticiones en el origen para verificar Carencia de Ajuste (Méndez (1977) y Myers (1971)). Concluida la etapa de diseño, experimentación y ajuste se pasa a 9.

9.- Probar Carencia de Ajuste para el modelo de segundo orden. Debido a que un modelo de segundo orden es lineal en los parámetros, los comentarios al respecto hechos anteriormente para el modelo de primer orden son válidos en este caso. Si hay Carencia de Ajuste se pasa a 10, si no a 12.

10.- Intentar transformaciones, ajustar modelo y pasar a 11.

11.- Nuevamente verificar Carencia de Ajuste. Si hay evidencia de Carencia de Ajuste pasar a 16 e intentar estrategias que quizá no esten dentro del contexto de modelos lineales. Si no ir a 12.

12.- Hacer inferencias sobre el modelo. Si este no presenta ninguna dificultad pasar a 13, en caso contrario regresar a 8.

13.- Aplicar Análisis Canónico y construir curvas de nivel de Superficie de Respuesta. Ir a 14.

14.- Si el punto estacionario se encuentra fuera de la región experimental o es un punto silla se pasa a 15. En caso contrario la investigación ha concluido y se pasa a 17.

15.- Aplicar Análisis de Cordilleras e ir a 8.

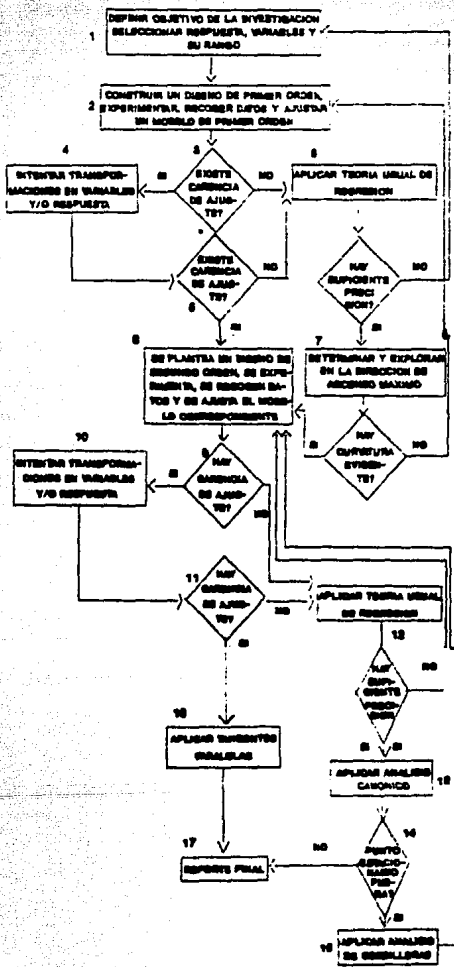
16.- Aplicar Tangentes Paralelas. Haber llegado al punto 16 significa que la respuesta corresponde a la de un modelo de orden superior no lineal. Un análisis similar al presentado en los capitulos II, III, IV para modelos de orden mayor que 2 no se conoce. En el capítulo 8 de Khuri y Cornell (1987) se hace un tratamiento para modelos no lineales abarcando los aspectos de diseño, ajuste y optimización para este

tipo de casos. Otra referencia sobre optimización con modelos no lineales es Marquardt (1959).

17.- Elaborar reporte final sobre la investigación
La metodología explicada de los puntos 1 a 17 puede tener variantes de acuerdo a cada situación concreta.

Se finalizan estas conclusiones con algunos comentarios sobre el problema de optimización simultanea de varias respuestas o problema de multirespuestas. Una posibilidad para resolverlo es aplicar las técnicas del capítulo I, fijando niveles "convenientes" en todas las respuestas excepto en una y optimizar respecto a esta con Multiplicadores de Lagrange. Este procedimiento no se puede aplicar en el caso en que se desconozcan niveles convenientes de respuesta. En el capítulo 7 de Khuri y Cornell (1987) se trata el desarrollo básico para estudiar este tipo de situaciones. Se plantean diseños, métodos de estimación y técnicas de optimización. En esta área los estudios apuntan sobre todo a la búsqueda de diseños adecuados, ya que un diseño eficiente para una respuesta puede no ser eficiente para otras. La experimentación secuencial propia del problema de Superficie de Respuesta resulta un reto en el caso de multirespuestas: la decisión para hacer un cambio de diseño experimental no sólo depende de una sino de varias respuestas. Otro trabajo enfocado a multirespuesta es el de Hoerl (1959).

A continuación el diagrama de flujo que ilustra la metodología de los puntos 1 a 17.



BIBLIOGRAFIA.-

- Hoerl, A.E. (1959). Optimum Solution of Many Variables Equations, *Chemical Engineering Progress*, Vol. 55, No.11, 69-78.
- Khuri, A.I. y J.A. Cornell (1987). *Response Surfaces*, New York: Marcel Dekker, Inc.
- Marquardt, D.W. (1959). Solution of Nonlinear Chemical Engineering Models, *Chemical Engineering Progress*, Vol. 55, No.6, 65-70.
- Méndez, I. (1977). *Metodología de Superficie de Respuesta*, Comunicaciones Técnicas, I.I.M.A.S., U.N.A.M.
- Myers, R.H. (1971). *Response Surface Methodology*, Boston: Allyn and Bacon Inc.